



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky, informatiky
a mezioborových studií ■

Modelování hydratace bentonitu v hlubinném úložišti při nehomogenním přítoku vody z horniny

Disertační práce

Studijní program: P3901 – Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor: 3901V055 – Aplikované vědy v inženýrství

Autor práce: **Ing. Ilona Škarydová**
Vedoucí práce: doc. Ing. Milan Hokr, Ph.D.





TECHNICAL UNIVERSITY OF LIBEREC
Faculty of Mechatronics, Informatics
and Interdisciplinary Studies ■

Modelling of Bentonite Hydration in the Deep Geological Repository with Inhomogeneous Inflow from Rock

Dissertation

Study programme: P3901 – Applied Sciences Engineering
Study branch: 3901V055 – Applied Sciences Engineering
Author: **Ing. Ilona Škarydová**
Supervisor: doc. Ing. Milan Hokr, Ph.D.



Prohlášení

Byla jsem seznámena s tím, že na mou disertační práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé disertační práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li disertační práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědoma povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Disertační práci jsem vypracovala samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím mé disertační práce a konzultantem.

Současně čestně prohlašuji, že tištěná verze práce se shoduje s elektronickou verzí, vloženou do IS STAG.

Datum:

Podpis:

Abstrakt

Plánování hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva je aktuálním problémem v České republice i ve světě. Pro jeho správnou funkčnost a bezpečnost je důležitá analýza procesů, které budou probíhat v jeho přírodních i inženýrských bariérách. Jedním z uvažovaných dějů je hydratace bentonitu, kterou se tato disertační práce zabývá na základě numerických simulací. Zaměřuje se přitom na nehomogenní přítok podzemní vody, který způsobuje nerovnoměrné syčení bentonitu a zapříčiňuje jeho netriviální chování (bobtnání, plasticita).

V práci je prokázána použitelnost méně obvyklé koncepce s nelineární difuzivitou závislou na stupni saturace, která ekvivalentně nahrazuje standardně používanou Richarsovu rovnici na modelech s netriviálně definovanými okrajovými podmínkami. Pomocí jejich různých variant je realizován vliv syčení puklinami a okolní horninovou maticí na hydrataci. Vyhodnocena je také citlivost úloh na uvažovanou propustnost okolní horniny a výsledky jsou v některých případech srovnány s měřenými daty, nebo s výsledky jiných výzkumných skupin. V rámci disertační práce bylo také demonstrováno řešení sdruženého hydro-mechanického problému.

Řešené modely vychází z rozsáhlých in situ experimentů „Bentonite Rock Interaction Experiment“ a „Prototype Repository“ realizovaných v rámci mezinárodního projektu „Task Force on Engineered Barrier Systems“.

klíčová slova: hydratace, bentonit, hlubinné úložiště vyhořelého jaderného paliva, numerické simulace, ANSYS

Abstract

Planning a deep repository of spent nuclear fuel is a current issue of research groups not only in the Czech Republic. The analysis of processes, which will occur in its natural and engineered barriers, is necessary for the proper functionality and safety of the repository. One of the considered processes is bentonite hydration. Numerical simulations of bentonite hydration is the topic of this thesis, which focuses on the inhomogeneous groundwater inflow that causes non-uniform bentonite saturation and other non-trivial behaviour (plasticity, swelling).

This thesis demonstrates the applicability of a less common conception, with the non-linear diffusivity dependent on the degree of saturation, which approximates standardly used Richards' equation. Problems are simulated with different variants of non-trivial boundary conditions, which represent the influence of fractures or rock matrix on bentonite hydration. Sensitivity of the problems on the rock permeability is also evaluated. Some of the results are compared with measured data or with results of other research groups. A solution of the coupled hydro-mechanical problem is also demonstrated within the thesis.

Solved models are based on the large-scale in situ experiments „Bentonite Rock Interaction Experiment“ and „Prototype Repository“, which were realized within the international project „Task Force on Engineered Barrier Systems“.

keywords: hydration, bentonite, deep repository of spent nuclear fuel, numerical simulations, ANSYS

Poděkování

Na tomto místě bych ráda poděkovala svému školiteli doc. Ing. Milanu Hokrovi, Ph.D. za podnětné odborné rady a konzultace v průběhu studia a při zpracování disertační práce.

Dále děkuji Správě úložišť radioaktivních odpadů, která z větší části financovala výzkum a účast na projektu „Task Force on Engineered Barrier Systems“ v rámci zakázek č. SD2010-08 a SO2014-029.

Práce byla podpořena také Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu SGS č. 21066/115 na Technické univerzitě v Liberci.

V neposlední řadě patří mé poděkování i rodině a přátelům za podporu a trpělivost.

Obsah

Obsah	9
Seznam zkratek	10
Seznam symbolů	11
Seznam obrázků	12
Seznam tabulek	14
1 Úvod	15
1.1 Cíle disertační práce	17
1.2 Koncepce hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva	18
1.2.1 Přírodní bariéra – horninové prostředí	18
1.2.2 Inženýrská bariéra – bentonit	19
2 Současný stav zkoumané problematiky	21
2.1 Metody pro popis a simulaci rozpukaného horninového prostředí . . .	21
2.2 Modely dějů v částečně saturovaném prostředí	23
2.2.1 Přístupy pro modelování hydraulického chování bentonitu . .	23
2.2.2 Přístupy pro modelování mechanického chování bentonitu . .	24
2.3 Experimenty popisující hydrataci bentonitu	25
3 Fyzikální popis chování bentonitu a dalších materiálů	27
3.1 Popis hydraulického chování pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou	27
3.1.1 Odvození difuzní rovnice s nelineární difuzivitou	28
3.2 Popis mechanického chování	31
3.3 Materiálové parametry použité v modelech	32
3.3.1 Bentonit	33
3.3.2 Horninová matrice	35
3.3.3 Pukliny	36
4 Metodika matematického modelování	38
4.1 Přístupy k modelování v horninovém prostředí	38
4.2 Postup při definování modelů	38
4.3 Numerická metoda – metoda konečných prvků	40
4.4 Výpočetní software ANSYS	41

5	Testovací úlohy pro modely s rozhraním bentonit-hornina	43
5.1	Popis testovacích úloh	44
5.2	Výsledky testovacích úloh	45
5.3	Vyhodnocení	46
6	Modelování hydratace bentonitu podle experimentu BRIE	48
6.1	Popis experimentu Bentonite Rock Interaction Experiment (BRIE) .	49
6.2	Modelování experimentu Water Uptake Test	51
6.2.1	Popis experimentu Water Uptake Test	51
6.2.2	Popis modelu	51
6.2.3	Porovnání výsledků s naměřenými daty	53
6.2.4	Vyhodnocení	54
6.3	1D osově symetrický testovací model	57
6.4	2D osově symetrické modely	58
6.4.1	Popis 2D osově symetrického modelu bez horniny	58
6.4.2	Popis 2D osově symetrického modelu s horninou	59
6.4.3	Výsledky modelů	61
6.4.4	Vyhodnocení	64
6.5	3D modely hydratace bentonitu	65
6.5.1	Hydratace bentonitu puklinami bez vlivu horniny	65
6.5.2	Hydratace bentonitu puklinami a horninovou maticí	69
6.5.3	Vyhodnocení	72
6.6	3D sdružené HM modely	73
6.6.1	Popis modelu	73
6.6.2	Výsledky hydraulické části modelu	74
6.6.3	Výsledky mechanické části modelu – bentonit	75
6.6.4	Výsledky mechanické části modelu – horninová matrice	77
6.6.5	Vyhodnocení	77
7	Modelování hydratace bentonitu podle experimentu Prototype Repository	80
7.1	Popis experimentu Prototype Repository (PR)	80
7.1.1	Popis vybraných měření provedených v rámci experimentu Prototype Repository	81
7.2	Modely hydratace bentonitu v ukládacích vrtech DA3551G01 a DA3545G01	84
7.2.1	Popis modelů	84
7.2.2	Varianty okrajových podmínek	85
7.2.3	Vyhodnocení výsledků pro jednotlivé varianty	88
7.2.4	Vyhodnocení	92
Závěr		95
	Přínosy disertační práce	97

Literatura	103
Seznam publikací autorky	103
Přílohy	105
Příloha A	106
Příloha B	107
Příloha C	108
Příloha D	109
Příloha E	115
Příloha F	117

Seznam zkratek

APDL	ANSYS Parametric Design Language
BBM	Barcelona Basic Model
BRIE	Bentonite-Rock Interaction Experiment
DECOVALEX	DEvelopment of COupled models and their VALidation against EXperiments
DFN	diskrétní puklinová síť (Discrete Fracture Network)
FEM	metoda konečných prvků (Finite Element Method)
HM	hydro-mechanický (proces)
HÚ	hlubinné úložiště vyhořelého jaderného paliva
JE	jaderná elektrárna
PR	Prototype Repository experiment
REV	reprezentativní elementární objem
SKB	Svensk Kärnbränslehantering AB – Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co
SÚRAO	Správa úložišť radioaktivních odpadů
TF EBS	projekt „Task Force on Engineered Barrier Systems“
THM	termo-hydro-mechanický (proces)
VJP	vyhořelé jaderné palivo
XFEM	metoda rozšířených konečných prvků (Extended Finite Element Method)

Seznam symbolů

c	měrná tepelná kapacita
C_{ijkl}	tenzor elastických koeficientů
$D(S_l)$	difuzivita závislá na stupni saturace
$D_b(S_l)$	difuzivita bentonitu závislá na stupni saturace
$D_h(S_l)$	difuzivita horniny závislá na stupni saturace
e	číslo pórovitosti
\vec{g}	tíhové zrychlení
h	tlaková výška
k	propustnost
k_r	relativní propustnost
M_w	molární hmotnost vody
n	pórovitost
p_0	parametr van Genuchten retenční křivky
p_a	atmosferický tlak
p_l	tlak ve vodě
\vec{q}	Darcyovská rychlost
R	univerzální plynová konstanta
RH	relativní vlhkost
$s(RH, T)$	sací tlak
S_l	stupeň saturace (nasycení)
t	čas
T	teplota
u_{sum}	velikost vektoru posunutí
γ	koeficient tepelné vodivosti
ϵ_{kl}	tenzor deformace
θ_e	efektivní vlhkost (efektivní stupeň saturace)
κ	koeficient specifické storativity
λ	parametr van Genuchten retenční křivky
μ	dynamická viskozita
ρ_d	objemová hmotnost suchého bentonitu
ρ_m	objemová hmotnost nasyceného bentonitu
ρ_s	zdánlivá hustota pevných částic bentonitu
ρ_w	hustota vody
σ_{ij}	tenzor napětí
ω	obsah vody v bentonitu

Seznam obrázků

- Obr. 1.1 Schematické zobrazení vrtu hlubinného úložiště KBS-3 koncepce
- Obr. 1.2 Ukázky surového a kompaktovaného bentonitu a bentonitových pelet
- Obr. 1.3 Vnitřní struktura bentonitu
-
- Obr. 2.1 Možnost umístění pukliny v řešené doméně v rámci XFEM metody
-
- Obr. 3.1 Experimentálně určené retenční křivky bentonitu typu MX-80 pro různé objemové hustoty v suchém stavu
- Obr. 3.2 Ukázka hystereze retenční křivky bentonitu
- Obr. 3.3 Mechanické parametry bentonitu v závislosti na stupni saturace
- Obr. 3.4 Difuzivita pro bentonit, horninu a puklinu, zobrazeny původní (doporučené) a modifikované průběhy v logaritmickém měřítku
- Obr. 3.5 Difuzivita pro bentonit a horninu v závislosti na stupni saturace, zobrazeny průběhy s kalibrovanými hodnotami na výsledky [7]
- Obr. 3.6 Příklady retenčních křivek pro horninu z literatury, převzato z [7]
-
- Obr. 4.1 Schematické znázornění postupu při definici a řešení modelu
- Obr. 4.2 Volba REV v závislosti na měřítku úlohy, převzato z [6] a upraveno
-
- Obr. 5.1 Řešené varianty modelů – různé kombinace materiálů a počátečních hodnot stupně saturace
- Obr. 5.2 Vývoj horizontálních profilů stupně saturace v čase 8 let pro řešené varianty testovacích modelů
- Obr. 5.3 Vývoj horizontálních profilů stupně saturace v čase pro modely ve variantě 1, porovnání pro retenční křivku bentonitu podle van Genuchtena a podle mocninného zákona
-
- Obr. 6.1 Tunel s vrty v experimentu BRIE
- Obr. 6.2 Schematické znázornění experimentu Water Uptake Test
- Obr. 6.3 Geometrie a okrajové podmínky pro model podle experimentu Water Uptake Test
- Obr. 6.4 Kumulativní objem vody v závislosti na čase pro modely podle experimentu Water Uptake Test
- Obr. 6.5 Relativní vlhkost v závislosti na čase v různých vzdálenostech od osy modelu pro modely podle experimentu Water Uptake Test
- Obr. 6.6 Radiální rozložení saturace v čase 107 a 203 dní pro modely podle experimentu Water Uptake Test
- Obr. 6.7 Porovnání výsledků modelů řešených v softwarech ANSYS a ISEKIT v rámci experimentu Water Uptake Test

- Obr. 6.8 Porovnání měřených dat a výsledků ze softwaru Code_Bright v rámci experimentu Water Uptake Test, převzato z [1]
- Obr. 6.9 Porovnání radiálních průběhů saturace pro 1D osově symetrický model (ANSYS vs. Code_Bright)
- Obr. 6.10 Porovnání radiálních průběhů saturace pro 1D osově symetrický model (analytické řešení vs. Code_Bright)
- Obr. 6.11 Výpočetní sítě 1D a 2D osově symetrických modelů pro výpočet hydratace bentonitu
- Obr. 6.12 Geometrie a aplikované okrajové podmínky pro 2D osově symetrický model s tunelem a okolní horninou
- Obr. 6.13 Porovnání výsledků pro 2D osově symetrický model s horninou s doporučenými parametry (vlevo) s referenčními daty převzatými z [7]
- Obr. 6.14 Porovnání výsledků pro 2D osově symetrický model s horninou s modifikovanými parametry s referenčními daty převzatými z [7]
- Obr. 6.15 Geometrie vrtů KO0017G01 a KO0018G01 s vyznačenými polohami puklin ve dvou výpočetních variantách
- Obr. 6.16 Znázornění okrajových podmínek pro 3D modely s vlivem horniny (vlevo) a průběh okrajové podmínky reprezentující tok vody horninou do bentonitu (vpravo)
- Obr. 6.17 3D geometrie HM modelu a průběh saturace v řezu
- Obr. 6.18 Intenzita napětí s_{int} a složky vektoru posunutí u_x u_y a u_z (varianta s materiálem „Puklina 2“ a puklinou o šířce 10 cm)
- Obr. 6.19 Grafy závislosti posunutí v tečném směru na vzdálenosti směrem vpravo a vlevo od vrtu

- Obr. 7.1 Schematické znázornění ukládacího tunelu s vrty experimentu Prototype Repository
- Obr. 7.2 Schéma experimentu Prototype Repository s detailem ukládacího vrtu s označením bentonitových bloků, převzato z [46] a upraveno
- Obr. 7.3 Znázornění tzv. duální sítě pro předpis okrajových podmínek v modelech podle experimentu Prototype Repository
- Obr. 7.4 Výpočetní síť pro vrty experimentu Prototype Repository se zobrazením zadaných okrajových podmínek u dvou vybraných variant
- Obr. 7.5 Pozice, ve kterých je porovnáván průběh relativní vlhkosti s naměřenými daty v obou vrtech experimentu Prototype Repository
- Obr. 7.6 Průběhy relativní vlhkosti a stupně saturace ve vybraných pozicích, porovnání model vs. měření pro vrt DA3551G01 (Prototype Repository)
- Obr. 7.7 Průběhy relativní vlhkosti a stupně saturace ve vybraných pozicích, porovnání model vs. měření pro vrt DA3545G01 (Prototype Repository)

Seznam tabulek

- Tab. 3.1 Počáteční hodnoty materiálových parametrů pro bentonit v experimentu BRIE
- Tab. 3.2 Materiálové parametry pro výpočet difuzivity pro bentonit, horninu a puklinu
- Tab. 3.3 Hodnoty materiálových parametrů pro určení mechanického chování pro bentonit, horninu a puklinu
-
- Tab. 6.1 Definice materiálových modelů pro bentonit vyjádřených pomocí difuzivity v simulacích experimentu Water Uptake Test
- Tab. 6.2 Počty uzlů a elementů a minimální a maximální velikost elementů ve 2D osově symetrických modelech
- Tab. 6.3 Počty uzlů a elementů ve výpočetních sítích 3D hydraulických modelů vrtů KO0017G01 a KO0018G01 experimentu BRIE
- Tab. 6.4 Rychlost saturace pro 3D modely vrtů s puklinami v porovnání s 2D osově symetrickým modelem bentonitu (bez vlivu saturace horninou)
- Tab. 6.5 Rychlost saturace pro 3D modely vrtů s puklinami v porovnání s 2D osově symetrickým modelem bentonitu (s vlivem saturace horninou, materiál „Hornina 1“, „Hornina 2“)
- Tab. 6.6 Časy dosažení 50%, 75% a 90% stupně saturace pro dvě různé varianty modelu lišící se tloušťkou pukliny pro 3D HM model
- Tab. 6.7 Maximální (absolutní) hodnoty velikosti vektoru posunutí, 1. hlavní napětí a faktor intenzity napětí pro obě varianty puklinového materiálu a obě uvažované šířky pukliny ve 3D HM modelu
-
- Tab. 7.1 Výsledky měření přítoků do vrtů experimentu Prototype Repository, převzato z [57] a upraveno
- Tab. 7.2 Výsledky měření přítoků do vrtů experimentu Prototype Repository pomocí zmapovaných propustných puklin, převzato z [57] a upraveno
- Tab. 7.3 Počet a celková plocha elementů pro předpis okrajové podmínky v modelech Prototype Repository pro oba uvažované vrty, hodnoty jsou uvažovány po přepočtení na konečně-prvkovou síť modelu
- Tab. 7.4 Jednotlivé hodnoty toků předepsané v simulovaných variantách a, b, c jako okrajové podmínky pro dvě naměřené hodnoty přítoku do vrtů DA3551G01 a DA3545G01

1 Úvod

Práce se zabývá aplikacemi numerických simulací pro studium termo-hydro-mechanických (THM) jevů v hlubinném úložišti (HÚ) vyhořelého jaderného paliva (VJP), jehož plánování je již několik let aktuální otázkou nejen ve světě, ale také v České republice. Konkrétně se práce zaměřuje na proces hydratace inženýrské bariéry HÚ tvořené bentonitem a na děje probíhající na jeho rozhraní s přírodní bariérou (hostitelskou horninou). Proces hydratace bentonitu posuzujeme pomocí numerických simulací na různě podrobných modelech v různých měřítkách, některé jsou definovány uměle, některé vychází z reálných laboratorních a in situ experimentů.

Všeobecnou potřebou pro bezpečnost HÚ je schopnost predikce fyzikálních i chemických dějů, které budou v jednotlivých bariérách úložiště probíhat. Pro většinu jevů je predikce ve velké míře možná díky známému fyzikálnímu a matematickému popisu pomocí rovnic a prostřednictvím známých modelů a jejich numerických řešení. Přesto díky složitým vlastnostem bentonitu nelze jeho chování v současném stavu poznání dostatečně přesně vyjádřit a to kvůli různým nejistotám, ke kterým patří také nerovnoměrné sycení bentonitu.

Výzkum kolem jevů v bentonitu je rozsáhlý a zahrnuje mnoho vědních oborů přesahujících zaměření této práce (geotechnika, geochemie, mineralogie – např. různá minerální složení bentonitu, stupeň kompaktování a tvar bentonitových pelet, kterými se tato práce nezabývá), ale v České republice je dalšími pracovišti pokryta velká část těchto výzkumných témat.

Z oblasti výzkumu THM jevů v bentonitu jsou hlavním prostředkem k makroskopickému pozorování jeho sycení a bobtnání nejrůznější experimenty. V počátcích výzkumu souvisejícího s analýzou HÚ, byly nejdříve definované jednodušší laboratorní testy, které uvažovaly rovnoměrný přítok vody. Se vzrůstajícími znalostmi a zkušenostmi se začaly realizovat i složitější terénní měření a experimenty přímo v horninovém prostředí v rámci podzemních laboratoří, které uvažují nerovnoměrné sycení bentonitu.

Dosavadní simulovaná řešení THM jevů v bentonitu vždy navazovala na experimenty a nebyla explicitně soustředěná na nehomogenní přítok podzemní vody z okolní horniny do bentonitu. Laboratorní experimenty menšího rozsahu byly obvykle realizovány cíleně s uvažováním rovnoměrné hydratace (v malém měřítku je provedení i vyhodnocení nerovnoměrného přítoku problematické). Terénní experimenty jsou definovány podobným způsobem, kdy je sycení realizováno buď zvodňovou vrstvou nebo pomocí zařízení distribuujícího vodu. Pokud je v terénním experimentu uvažován přirozený nehomogenní přítok (prostřednictvím puklin nebo jiných

nespojitésti), nebyla dosud k dispozici měřená data v tak komplexní podobě, aby bylo modelem možné postihnout chování experimentu v zobecnitelné formě.

Podrobné studium sycení bentonitu (a jeho důsledky na další THMC procesy) je v posledních letech zájmem odborných skupin zabývajících se plánováním HÚ v zahraničí. Tímto způsobem byly definovány modelové úlohy pro řešení procesů probíhajících v experimentech pomocí numerických simulací v projektu „Task Force on Engineered Barrier Systems“ (TF EBS) v roce 2010. Jeho řešením se paralelně s významnými zahraničními týmy účastní i pracoviště TUL, se značným podílem doktorandky a školitele. Řešené téma je aktuálním vědeckým problémem v tomto oboru a některé výsledky v disertační práci byly průběžně konfrontovány s výsledky ostatních skupin (např. švédské SKB).

Disertační práce obsahuje různé pohledy na postihnutí nehomogenního přítoku podzemní vody z horniny do bentonitu – geometrickou reprezentací, měřítkem, mírou nejistoty měřených dat. Použitý model je před použitím na složitější podmínky terénních experimentů validován na jednodušších modelech, ať už porovnáním s výsledky z jiných simulačních nástrojů, nebo s laboratorními daty (ve stejnoměrných podmínkách, např. 1D symetrie). Tímto postupem je ověřen obecný koncept a je možné se lépe soustředit na konkrétní reprezentace okrajových podmínek.

Struktura disertační práce

V následující části bude popsána struktura disertační práce – obsah rozlišený podle jednotlivých kapitol.

Úvodní kapitola vymezuje téma disertační práce a popisuje její cíle. Pro pochopení souvislostí je zde uveden i krátký popis hlubinného úložiště, jeho koncepce, funkce a jeho jednotlivých bariér.

Kapitola 2 popisuje současný stav zkoumané problematiky, metody, které se využívají k numerickým simulacím v horninovém prostředí a v prostředí bentonitu. V závěru kapitoly jsou popsány také vybrané laboratorní i terénní experimenty realizované za účelem výzkumu sycení bentonitové bariéry.

Kapitola 3 uvádí konkrétní použitou koncepci pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou, koncepci použitou pro řešení procesu bobtnání bentonitu a dále aplikované konstituční vztahy a materiálové parametry. V kapitole 4 je krátce popsána metodika pro definici modelů v horninovém prostředí a také použitá numerická metoda a výpočetní software ANSYS.

Další kapitoly se zabývají konkrétními numerickými simulacemi provedenými v rámci této práce. Nejprve jsou představeny v kapitole 5 testovací úlohy popisující procesy na rozhraní různě saturovaného bentonitu a horniny.

Stěžejní část tvoří kapitoly 6 a 7, ve kterých jsou popsány simulované problémy, jejich definice a řešení. Kapitola 6 se zabývá modely vztahujícími se k experimentu „Bentonite Rock Interaction Experiment“ (BRIE), kapitola 7 pak simulacemi experimentu „Prototype Repository“ (PR).

V závěru je práce shrnuta a jsou zde popsány i její přínosy a návrhy navazujících prací. V následujících částech je uvedena použitá literatura, seznam publikací autorky a obrazové přílohy.

1.1 Cíle disertační práce

Disertační práce je zaměřena na zkoumání procesu hydratace bentonitu v HÚ prostřednictvím numerických simulací. Oproti dosavadním pracím se zaměřuje na podmínky nehomogenního přítoku podzemní vody (podmínky nerovnoměrného sycení).

- Prostřednictvím literární rešerše shrnout vybrané postupy a metody, které se využívají při simulacích v horninovém prostředí a v bentonitu.
- Popsat a charakterizovat proces sycení bentonitu prostřednictvím numerických simulací s nehomogenním přítokem podzemní vody s využitím dat z realizovaných experimentů
 - definovat modely, které vyjadřují různé možnosti způsobů hydratace pomocí aplikovaných okrajových podmínek,
 - přispět k porozumění a interpretaci dat ze souvisejících experimentů.
- Zhodnotit využitelnost a míru efektivnosti použité alternativní koncepce pro simulaci sycení bentonitu pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou
 - zhodnotit možnosti a omezení koncepce pro popis hydratace bentonitu,
 - zhodnotit možnosti a omezení využití zjednodušeného popisu pro modelování sdruženého hydro-mechanického procesu v bentonitu.
- Prostřednictvím numerických simulací přispět k poznání procesů, které probíhají v bentonitu a na rozhraní hornina-bentonit při jeho sycení.

Simulace hydratace bentonitu s případnými dalšími vlivy provedené v rámci disertační práce navazují na mezinárodní projekt „Task Force on Engineered Barrier Systems“ (TF EBS), který sdružuje několik týmů zabývajících se modelováním procesů v inženýrských bariérách plánovaného hlubinného úložiště.

1.2 Koncepce hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva

Pro pochopení souvislostí je vhodné začít se stručným popisem koncepce hlubinného úložiště, které je v České republice plánováno pod vedením Správy úložišť radioaktivních odpadů (SÚRAO) [64] a z velké části jsou z jejích informačních materiálů čerpány informace uvedené v této kapitole.

Radioaktivní odpady vznikají v reaktorech jaderných elektráren (JE), ale v menší míře i v průmyslu, zdravotnictví a výzkumu. Odhadované množství nízko- a středněaktivních odpadů vyprodukovaných v České republice je asi 450 tun za rok, navíc necelých 100 tun vysokoaktivních odpadů za rok produkují JE Dukovany a JE Temelín. Po vyjmutí z reaktoru je VJP skladováno v bazénu VJP a později je přemístěno do tzv. meziskladu VJP, buď v areálu JE Dukovany nebo v JE Temelín.

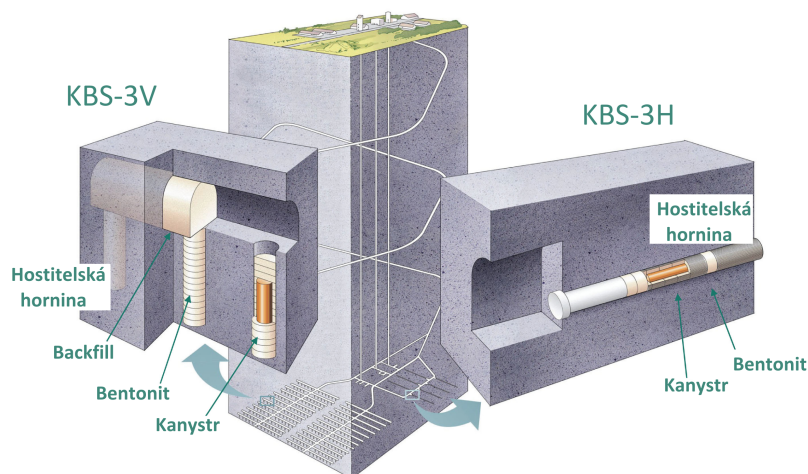
Protože tyto odpady vykazují radioaktivitu, je nutné řešit otázku jejich uložení na místě, kde nebudou představovat bezpečnostní riziko. Potenciální místo musí splňovat bezpečnostní podmínky dlouhodobě (vyhořelé jaderné palivo přestane být nebezpečné po desítkách až stovkách tisíc let). Vybraná lokalita musí vyhovovat jednak geologickým kritériím (stabilita horninového prostředí a schopnost izolace a zadržení nebezpečných látek potenciálně uniklých z úložiště), ale také legislativním a technickým požadavkům [64].

V přírodních podmínkách naší země se plánuje úložiště radioaktivních odpadů tzv. švédské koncepce, nazvané KBS-3 [61], (KBS-3H označuje horizontální a KBS-3V vertikální polohou úložného obalového souboru. V práci budeme trochu nepřesně termín „úložný obalový soubor“ zaměňovat názvy „kanystr“, „úložný kontejner“ nebo pouze „kontejner“. Úložiště by přitom mělo být vybudováno ve velké hloubce pod zemským povrchem (přibližně 500 m) v geologicky vhodném prostředí. V současné době je vytipováno šest lokalit, ze kterých je třeba v blízké době vybrat dvě vhodné, finální lokalita by měla být zvolena v roce 2025, viz [64].

Podle KBS-3 koncepce, jejíž schematické zobrazení je uvedeno na Obr. 1.1, bude vyhořelé jaderné palivo odizolováno třemi bariérami (přírodními a inženýrskými), díky kterým by na odpad neměly působit vlivy ze zemského povrchu a zároveň by nemělo být negativně ovlivněno okolní životní prostředí. Odpad bude uložen v kontejnerech z odolných kovů (např. ze speciální oceli s obsahem niklu, titanu, chromu či uhlíku nebo mědi) ve vrtu v horninovém prostředí. Prostor mezi kovovým kontejnerem a samotnou hostitelskou horninou bude vyplněn jílovitou horninou – bentonitem v několika formách (kompaktovaný bentonit, bentonitové pelety zobrazené na Obr. 1.2). Jednotlivé bariéry musí splňovat vlastnosti a požadavky, které popíšeme dále.

1.2.1 Přírodní bariéra – horninové prostředí

Hlubinné úložiště je nutné vybudovat v celistvém a stabilním hostitelském prostředí – v přírodních podmínkách České republiky to bude s největší pravděpodobností v žulovém nebo rulovém masivu. Horninové prostředí je složitým anisotropním a ne-



Obr. 1.1: Schematické zobrazení vrtu hlubinného úložiště KBS-3 koncepce s vertikálním a hornizontálním uložením kanystru, převzato z [56] a upraveno

homogenním médiem. Protože ve většině případů obsahuje i množství diskontinuit (makroskopických i mikroskopických puklin, zlomů a puklinových zón, které mohou být vyplněny vodou, vzduchem, nebo jinými plyny), je chování horniny závislé na uvažovaném měřítku. Dále musíme uvažovat i stálé napětí, pod kterým se horninový masiv nachází a účinky obsažené vody, plynů a vlivy působícího zbytkového tepla z uloženého radioaktivního odpadu. Všechny fyzikální procesy, které v hornině probíhají se vzájemně ovlivňují a jako celek působí na pevnost, deformovatelnost a propustnost masivu. Nelinearita a složité chování horninového prostředí je důvodem, proč je nutné k jeho popisu a modelování přistupovat speciálními metodami.

1.2.2 Inženýrská bariéra – bentonit

Bentonit je typ horniny vyznačující se vysokou sorpční schopností, bobtnáním a specifickým mechanickým chováním. Skládá se z vysokého podílu jílových minerálů (okolo 80 %), obzvláště montmorillonitu, biedellitu, nebo saponitu [37], které jsou uspořádány ve vrstvičkách oddělených prázdným prostorem – mezivrstvením patrným na Obr. 1.3. Bentonit bude do HÚ uložen v částečně saturovaném stavu. Při následném přijímání vody z okolního prostředí dokáží vrstvičky montmorillonitu mezi sebe navázat množství vody, díky tomu bentonit výrazně zvětšuje svůj objem – bobtná a zároveň mění své mechanické vlastnosti (makroskopické chování je závislé na mikrostruktuře).

Podle [14] rozdělujeme bentonity v závislosti na typu tzv. výměnného kationtu nacházejícím se v mezivrstvení na:

- **méně bobtnavé bentonity:** výměnným kationtem je Ca^{2+} , K^{+} , Mg^{2+} , tyto bentonity bobtnají pouze v menším rozsahu, jejich vlastnosti je možné do určité míry vylepšit tzv. aktivací,

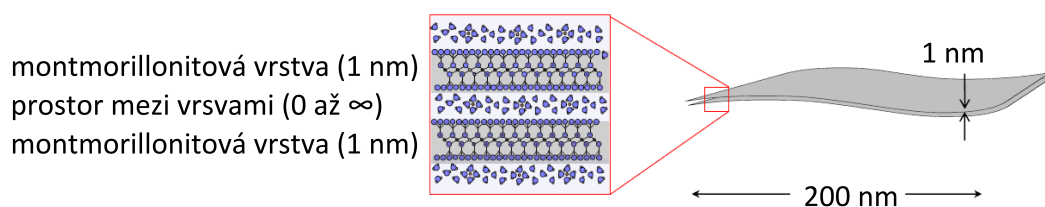
- **Na-bentonity:** bentonity „wyomingského“ typu, výměnným kationtem je Na^+ , tyto bentonity mají silnou bobtnací schopnost, patří mezi ně i materiál MX-80 uvažovaný v popsáných simulacích.

Pro své jedinečné vlastnosti byl bentonit vybrán jako jedna z inženýrských bariér v hlubinném úložišti – vyznačuje se vysokým podílem pórů (okolo 40 %) a velice nízkou propustností, díky níž se sníží tok vody v ukládacím vrtu. Zároveň vykazuje vysoký bobtnací tlak při kontaktu s vodou, a proto vrt utěsňuje, a tím zamezuje přístupu bakteriím způsobujícím korozi kontejneru. Navíc v případě úniku radioaktivních látek z kontejneru dokáže sorbovat radionuklidy a zpomalovat transport látek ve vrtu [43]. Protože vykazuje plastické chování, předpokládá se, že by měl tlumit účinky napětí působícího v hornině (zamezit jeho přenosu ke kontejneru).

Díky komplexnímu chování je při simulacích procesů probíhajících v bentonitu v mnoha případech nutné zahrnout více fyzikálních jevů zároveň, protože dochází k jejich vzájemnému ovlivňování. Např. proudění vody v bentonitu způsobí jeho saturaci, která je zároveň ovlivňována okolní teplotou, současně hydratovanému bentonitu změní mechanické vlastnosti – zapříčiní plastické chování materiálu, což můžeme popsat jako sdružený termo-hydro-mechanický (THM) proces.



Obr. 1.2: VLEVO: šedý bentonit (Braňany), převzato z [37], VPRAVO: kompaktovaný bentonit a bentonitové pelety převzato z [14]



Obr. 1.3: Struktura bentonitu s vyznačenými vrstvami montmorillonitu a tzv. mezivrstvením, do kterého je schopen navázat velké množství vody (převzato z [43] a upraveno)

2 Současný stav zkoumané problematiky

V souvislosti se simulovanými ději, kterými se tato práce zabývá, je vhodné nejprve popsat v širším kontextu výhody a nevýhody přístupů, které se využívají pro numerické simulace v horninovém prostředí. Práce je zaměřena přímo na bentonit, proto je také velice důležité zvolit vhodné metody pro popis jeho chování – metody a postupy pro proudění vody v částečně saturovaném prostředí včetně případných sdružení s dalšími procesy (např. mechanické změny vlivem měnící se saturace).

Horninové prostředí, které obsahuje pukliny či jiná porušení, představuje v popsaných modelech médium, jehož prostřednictvím dochází k hydrataci bentonitu. Je tedy rovněž důležité znát přístupy a metody pro simulace v rozpukané hornině.

2.1 Metody pro popis a simulaci rozpukaného horninového prostředí

Horninové prostředí je specifické díky přítomnosti nespojitostí (puklin, zlomů, mikrotrhlin atd.). Existuje řada metod, které dokáží pukliny do modelové oblasti zahrnout a pracovat s nimi, některé jsou shrnuty v [39]. Tyto metody jsou založeny na různém vyjádření puklin (explicitním i implicitním popisu, které jsou konkrétněji specifikovány v [41]). V simulacích procesů probíhajících v horninovém prostředí uvedených v literatuře je často využívána metoda konečných prvků [74] a různé její obměny (rozšířená FEM, smíšená-hybridní FEM), ale i další numerické metody (metoda oddělených elementů, metoda konečných diferencí, metoda konečných objemů, atd.).

Základním a nejjednodušším postupem, v rámci metody konečných prvků, který byl poprvé použit v [31], je definice pukliny přímo v konečně-prvkové síti. Puklinovým prvkům jsou přiřazeny rozdílné vlastnosti oproti horninové matici, což zajišťuje jednoduchou definici, ale v praxi je tento přístup použitelný pouze pro malý počet puklin – kvůli složitější definici sítě a nutnosti lokálního zjemnění.

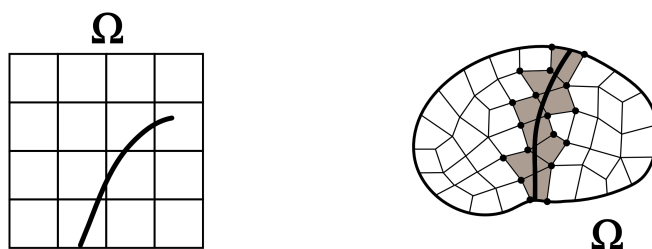
Náročnější na definici geometrie je vyjádření puklin jako samostatných objektů v síti konečných prvků, které je implementováno např. v komerčním systému FEFLOW [23], pro simulace proudění podzemní vody a transportu látek a tepla v porézních médiích (plně nebo částečně saturovaných). Pukliny jsou zde zahrnuty na úrovni konečně-prvkové diskretizace pomocí tzv. „Discrete Feature Elements“. Na podobném principu je založeno vyjádření puklin jako tzv. „elementů nižších dimenzí“ oproti horninové matici v nástroji Flow123d [12], vyvíjeném na Technické univerzitě v Liberci. Proudění je v tomto nástroji implementováno pomocí smíšené hybridní formulace FEM, transport rozpuštěných látek pak pomocí dvou metod:

metody konečných objemů nebo nespojité Galerkinovy metody. Výhodou přístupu implementovaném ve Flow123d oproti FEFLOW je možnost omezeného použití elementů nižších dimenzí i nezávisle na topologii sítě vyšší dimenze (tzv. nekompatibilní spojení).

Vyjádření téměř libovolného tvaru pukliny zcela nezávisle na diskretizaci horninové matrice (Obr. 2.1) umožňují metody ze skupiny rozšířených konečných prvků (Extended Finite Element Method – XFEM) [28]. Tyto metody jsou založeny na FEM, kterou zobecňují ve smyslu rozšíření prostoru řešení i pro řešení s předpokládaným nespojitým chováním v malé části oblasti. Metody umožňují vyjádření nespojitostí dvojího druhu:

- **silné:** skok v hodnotách uvažované veličiny (nespojité posunutí – trhliny),
- **slabé:** skok v hodnotách gradientu uvažované veličiny (nespojité napětí a deformace na rozhraní materiálů, povrchové vrstvy).

Hlavní výhoda XFEM je v konstrukci konečně-prvkové sítě, kdy nemusíme přizpůsobovat elementy reprezentující horninovou matici nespojitostem a síť v těchto místech zjemňovat. Nespojitosti totiž na hlavní síti nezávisí a jsou definovány zvlášť, což je schematicky znázorněno na Obr. 2.1. Horninová matrice je definována jako FEM kontinuum, modifikována je implementace tvarových funkcí elementů, do kterých nespojitost zasahuje (Obr. 2.1 vpravo). Metody ze skupiny XFEM se využívají k simulacím mechaniky rozpukané horniny, časovému vývoji puklin a využitím metody pro proudění podzemní vody se zabývá i pracoviště TUL [24].



Obr. 2.1: Schematické znázornění umístění pukliny v řešené doméně Ω v rámci XFEM a vyznačení tzv.obohacených uzlů, převzato z [27] a upraveno

Pro velké množství puklin (a husté puklinové sítě) je vhodné spojení kontinua a diskrétní puklinové sítě (Discrete Fracture Network – DFN), do vlastností kontinua přitom mohou být zahrnuty zprůměrované vlastnosti horninové matrice a nejmenších obsažených puklin. Tento přístup je implementován např. v simulačním nástroji ConnectFlow [3], který obsahuje modul NAMMU pro modelování porézního kontinua a modul NAPSAC pro reprezentaci diskrétní puklinové sítě.

K rozpukané hornině je také možné přistupovat jako k velkému množství bloků oddělených puklinami. Tento koncept je implementován ve velké skupině metod oddělených elementů (Discrete Element Methods – DEM) [22], které je možné použít zejména k mechanické analýze nespojitých materiálů zahrnující i horninové prostředí

s puklinami. Tyto metody mají původ v molekulární dynamice (výpočty pohybu částic u materiálů skládající se z jejich velkého množství) a v současné době jsou implementovány v řadě softwarových nástrojů. Jako nejznámější zástupce těchto metod můžeme uvést:

- **Discontinuous Deformation Analysis (DDA)** Metoda využívaná pro výpočty mechaniky hornin, která je založena na FEM. Díky implicitnímu vyjádření (ve smyslu řešení soustavy rovnic v každém časovém kroku) je tato metoda stabilní – v každém okamžiku je zajištěna rovnováha, což však zapříčiňuje větší požadavky na paměť při ukládání matice soustavy [41].
- **Distinct Element Method (DEM)** Explicitní metoda (opět ve smyslu řešeného numerického schématu), která řeší pohybové rovnice přímo, je založena na metodě konečných diferencí s posunutími jako neznámými. Na rozhraních horninových bloků je přitom použito kontaktních elementů pro pukliny. Metoda je implementována např. v softwarových nástrojích UDEC, 3DEC [18].

2.2 Modely dějů v částečně saturevaném prostředí

Pro popis chování bentonitu jako jílovité zeminy se využívá řada poznatků z mechaniky zemin. Protože je však jeho chování v řadě aspektů specifické (plastičnost, bobtnací schopnost), bylo nutné některé metody přetransformovat. V případě chování bentonitu bylo třeba zjednodušit jeho popis a obecně používané metody přizpůsobit, aby vystihovaly jeho chování. Bentonit je v simulacích ve většině případů uvažován jako částečně nasycené prostředí. V následujících částech popíšeme přístupy pro simulace hydraulického i mechanického chování bentonitu.

2.2.1 Přístupy pro modelování hydraulického chování bentonitu

Pro popis proudění vody v prostředí zemin se obecně využívají tzv. vícefázové modely, které popisují proudění vody prostřednictvím kapalně a plynné fáze [19]. V různých simulačních nástrojích jsou vícefázové modely různě definovány a ne vždy zahrnují shodné vlivy.

Jedna z variant uvažuje dvousložkové proudění ve dvou fázích (voda a vzduch, obě média obsažená v plynné i kapalně fázi). Takový model je implementován např. v softwaru Code_Bright [53] nebo v nástroji RockFlow [44]. Vyjádření přenosu vodní páry je různé, ale většinou je založeno na popisu difuze vodních par pomocí Fickova zákona. Transport tepla a vlhkosti ve formě páry a imobilní vody umožňuje software ISERIT [29] vyvíjený na TUL.

Pokud v procesu hydratace bentonitu neuvažujeme měnící se teplotu, je možné proces zjednodušit a zanedbat přenos vody pomocí vodních par, který není v případě nižších teplot významný. Některé simulační programy zanedbávají přenos vody pomocí plynné fáze (MUFTE_UG [33]). Pokud v modelech není plynná fáze vůbec uvažována, je možné proces hydratace popsat jako proudění v částečně satura-

ném prostředí podle Richardsovy rovnice [58], což je standardně využívaný popis pro hydrataci bentonitu (např. FEFLOW [23] nebo FLAC [38]).

Richardsovu rovnici je podle [8] navíc možné upravit do tvaru difuzní rovnice s nelineární difuzivitou, která je v popisu průběhu hydratace plně ekvivalentní, s malým omezením při stavu plné saturace, které však pro účely práce není významné, což je podrobněji popsáno v kapitole 3.1. Tento přístup má velkou výhodu – nevyžaduje využití nástroje specializovaného na proudění v částečně saturovaném prostředí. Pro simulaci tak stačí nástroj, ve kterém lze definovat model podle difuzní rovnice s nelineárním tvarem difuzivity závislé na stavové proměnné. Konceptně blízkým je také přístup prezentovaný v [48], který spojuje dva koncepty (advekční model a model pro difuzi vodní páry) pro popis hydratace bentonitu.

Jedním z důležitých vztahů pro všechny přístupy pro proudění v částečně saturovaném prostředí je tzv. retenční křivka, která vyjadřuje závislost mezi sacím tlakem a objemovou vlhkostí, tzn. že reprezentuje míru schopnosti zadržování vody materiálu při různé vlhkosti [19]. Tvar retenční křivky je dán geometrickými vlastnostmi pórů, ale závisí i na vlastnostech kapalně fáze – zvláště na povrchovém napětí a kontaktním úhlu. Takto definovaná retenční křivka je používána pro zeminy, kde je voda zadržována vlivem kapilárních sil. U bentonitu, i když je fyzikální princip retence odlišný, je možné jeho schopnost zadržovat vodu retenční křivkou také poměrně dobře vystihnout. K nejčastěji využívaným retenčním křivkám patří tzv. van Genuchten retenční křivka [66] (popsaná v kapitole 3.1.1, vztah (3.5)), nebo vztah Brooks a Corey [13].

2.2.2 Přístupy pro modelování mechanického chování bentonitu

Při procesu hydratace bentonitu dochází k mechanickým změnám v materiálu – bentonit bobtná. Na základě provedených experimentů je v publikaci [51] uvedeno zvětšení objemu bentonitu wyomingského typu v rozsahu 93 – 231 %. V průběhu hydratace se mění i jeho mechanické vlastnosti, proto je nutné i při simulacích mechanických procesů k bentonitu přistupovat specializovanými metodami.

Existuje řada konstitučních modelů plasticity, které popisují mechanické chování jílovitých zemin. Nejjednodušší materiálové modely uvažují pouze plně saturovaný stav materiálu [10], což je pro simulace sledující průběh hydratace nevyhovující.

Pro částečně saturovaný bentonit jsou základními modely tzv. modely Cam-Clay [59]. Pro slabě nebo středně bobtnavé materiály byl definován tzv. Barcelona Basic Model (BBM) [2], který na modely Cam-Clay navazuje. Tento model je založen na uvažování plastického chování se zpevněním a využívá dvě nezávislé sady napětových proměnných. Dokáže tak vystihnout řadu základních vlastností, které jsou pro částečně saturovaný materiál charakteristické a dříve musely být ošetřeny samostatnými modely. BBM má svá omezení obzvláště pro použití v různých aplikacích – díky nespojitosti okolo průniku dvou ploch plasticity se stává složitějším na implementaci.

Tato omezení se snaží ošetřit modifikovaný BBM [55], který byl vytvořen za účelem zjednodušení implementace a umožnění simulace elasto-plastického chování během cyklů mechanického a hydraulického zatěžování. Modifikace BBM spočívá

např. v definici hladké plochy plasticity v prostoru napětí – sací tlak a aplikace dvou ploch plasticity.

V závislosti na možnostech simulačního nástroje lze využít zjednodušený popis pomocí elastického modelu s nelineárním Youngovým modulem pružnosti podle [9] a [40]. Publikace [9] uvádí experimentálně získaná data a publikace [40] potom jejich využití v simulacích. Tento způsob vyjádření mechanického chování je použit v modelech v této práci, je tedy podrobněji popsán v kapitole 3.2. Pomocí tohoto přístupu bylo již dříve simulováno bobtnání bentonitu v rámci prací na projektu TF EBS (J. Novák [35]), ale na rozdíl od simulací v této práci byla použita konstantní hodnota difuzivity. I když je skutečné chování bentonitu lépe vystiženo pomocí výše uvedených sofistikovaných modelů typu BBM, v případě této práce není simulace sdružených hydro-mechanických (HM) problémů hlavním tématem, proto model s nelineárním modulem pružnosti dostačuje. V rámci provedených simulací chceme ukázat, že takto definovaný model dokáže poskytnout náhled na mechanické chování bentonitu při hydrataci a zároveň s určitou mírou přesnosti i kvalitativně popsat proces bobtnání.

2.3 Experimenty popisující hydrataci bentonitu

K zpřesnění popisu chování bentonitu při hydrataci byly realizovány nejrůznější zkoušky a měření, ať už menšího rozsahu (laboratorní), nebo rozsáhlé terénní experimenty. Získaná data jsou dále využívána nejen jako podklady pro numerické simulace, ale také pro validaci navržených modelů. Řada realizací a následného modelování testů byla provedena pod zastřešením projektu TF EBS vedeným švédskou organizací SKB ve spolupráci s několika výzkumnými skupinami ze Švédska, Finska, Velké Británie, Španělska, USA, Japonska a České republiky, které se zabývají výzkumem bariér HÚ.

V počátcích výzkumu souvisejícího s ukládáním VJP bylo chování bentonitu testováno na jednodušších laboratorních experimentech s homogenní hydratací (rovnoměrně rozložený zdroj vody, nejčastěji po celém povrchu vzorku). Takové chování popisují např. testy označené „BM1.1“ až „BM1.3“ [60], které byly definovány s tepelným a hydraulickým zatěžováním a omezeným prostorem pro bobtnání, aby co nejlépe vystihovaly chování bentonitu v HÚ (jednotlivé experimenty se liší konfigurací, rozměry, materiálem a časovým průběhem hydratace a zahřívání). I přes pečlivou definici modely navazující na výše uvedené experimenty kvůli obsaženým nejistotám většinou nepřinesly úplnou shodu s měřenými daty.

Ze zkušeností z dříve realizovaných experimentů a jejich simulací čerpá např. laboratorní Water Uptake Test, který byl proveden paralelně k in situ experimentu BRIE (který je podrobněji popsán v kapitole 6). Při přípravě experimentu se podařilo eliminovat řadu nejistot tak, že výsledky modelů simulujících průběh testu vykazují daleko lepší shodu jak s měřenými daty, tak mezi jednotlivými skupinami v rámci TF EBS. Výsledky pro modely definované pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou v rámci této práce jsou popsány v kapitole 6.2.

Z terénních zkoušek se řízeným sycením můžeme uvést: „Buffer container ex-

periment“ (BM2.1), případně „Canister Retrieval Test“ (CRT) [45] – oba uvažující vertikální uspořádání kontejneru v hornině, utěsnění bentonitovým bufferem a homogenní přítok vody. Obecnější a zároveň i náročnější na realizaci jsou rozsáhlé terénní experimenty v podzemních laboratořích v Äspö ve Švédsku, v Grimsel ve Švýcarsku a v podmínkách České republiky ve štole Josef popsané v dalším textu.

Z podzemní laboratoře Äspö ve Švédsku zmíníme dva rozsáhlé experimenty: Prototype Repository a BRIE, kde je kladen důraz na nerovnoměrnou saturaci bentonitu horninovým prostředím – nehomogenními přítoky. Prototype Repository [42], [52], [32] je jedinečný experiment v reálném měřítku, který simuluje chování hlubinného úložiště KBS-3V koncepce v reálných podmínkách horninového prostředí. Snaží se komplexně vystihnout chování bariér HÚ, včetně tepelného výkonu, který vyhořelé jaderné palivo vydává (neuvažuje radioaktivitu). Simulace tohoto terénního experimentu probíhají v současnosti a některé výsledky byly již publikovány např. 3D TH model a quasi 3D THM model s uvažováním puklin v [17] nebo 3D THM simulace s puklinami v [36]. Podrobnější popis experimentu a provedené simulace v rámci této práce jsou popsány v kapitole 7.

Experiment BRIE (Bentonite Rock Interaction Experiment) [15] a [7] se podobně jako Prototype Repository zabývá reálnými podmínkami HÚ v podobném nebo menším měřítku. Na rozdíl od Prototype Repository se však snaží v detailu vystihnout procesy souvisejícími s hydratací bentonitu na rozhraní bentonit-hornina bez tepelného a mechanického vlivu. Na simulacích souvisejících s BRIE se v současnosti pracuje, souhrné a souvislé výsledky nebyly ještě publikovány.

Další in situ experimenty byly provedeny ve švýcarské podzemní laboratoři Grimsel (difuze a migrace látek v bariérách HÚ, testy v rámci FEBEX projektu [69]). V českém prostředí to jsou testy (laboratorní i terénní) realizované Centrem experimentální geotechniky (CEG) Fakulty stavební ČVUT ve štole Josef [50]. Konkrétně můžeme zmínit řadu provedených laboratorních experimentů a z terénních měření např. experiment Mock-up Josef [70]. V tomto experimentu nejsou zohledněny podmínky nerovnoměrného syčení, ale jsou zde v rámci jeho monitoringu podrobněji sledovány další jevy (tepelné a mechanické zatěžování a navíc i děje probíhající v hornině v blízkém okolí kontejneru, protože i její chování může být probíhajícími procesy ovlivněno).

Některé další experimenty jsou zaměřeny hlavně na výzkum bobtnání bentonitu, ale ty nejsou hlavním zájmem této práce. Dva vybrané ukazují závislosti bobtnacího tlaku a deformace na počátečních podmínkách bentonitu – počáteční suché hustotě a obsahu vody (jako důsledky změn mikrostruktury při různých podmínkách) a jsou popsány např. v [68] (in situ experiment) a v [71] (laboratorní experiment). Publikace [65] se zabývá experimentálním výzkumem bobtnáním bentonitu a jeho potenciální schopností utěsnit pukliny v hornině.

3 Fyzikální popis chování bentonitu a dalších materiálů

V této kapitole je popsána metoda řešení – konkrétní fyzikální model pro hydraulické a mechanické chování bentonitu, který je využit pro simulace hydratace bentonitu v bariérách HÚ v této práci. Představen je i elasto-plastický model simulující bobtnání bentonitu aplikovaný ve sdružených HM modelech. Dále jsou také uvedeny nejdůležitější hydraulické a mechanické materiálové parametry a další data nezbytná k definici modelů.

3.1 Popis hydraulického chování pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou

Proudění v částečně saturovaném prostředí se dá popsat řadou přístupů, nejvyužívanější jsou uvedeny v kapitole 2.2.1. V simulacích přistupujeme k bentonitu jako k částečně saturovanému kontinuu, kde neuvažujeme proměnnou teplotu, takže zanedbáváme vliv vodní páry na hydrataci prostředí. V takovém médiu je možné proudění popsat pomocí Richardsovy rovnice [58], která je uvedena níže. Tento popis podle [19] vyžaduje, aby byla splněna neměnnost prostředí (bez pohybu a deformace), nestlačitelnost proudící vody a rovnost hodnot tlaku vzduchu v pórech hodnotě atmosferického tlaku.

Richardsovu rovnici je možné podle [8] vyjádřit pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou, kde jako neznámou veličinu uvažujeme stupeň saturace. Tato formulace je při průběhu procesu hydratace plně ekvivalentní ke klasickému vyjádření s tlakem jako neznámou veličinou. Omezení nastává při stavu plné saturace – klasický model tyto stavy popisuje pomocí kladných hodnot tlaku, u difuzního modelu je plná saturace popsána jedinou hodnotou: $S_l = 100 \%$, což odpovídá tlaku atmosferickému. Chování materiálu při plné saturaci však v simulacích uvedených v této práci nestudujeme, a proto je užití difuzního modelu plně dostačující.

Výhodou tohoto vyjádření je zejména možnost jeho využití ve velkém množství simulačních nástrojů. Není třeba specializovaný program, stačí, pokud výpočetní software umožňuje řešení difuzní rovnice s nelineární difuzivitou. Další předností difuzního modelu je snadnější realizace sdruženého procesu v některém z multifyzikálních výpočetních nástrojů, kde opět nejsou třeba specializované funkce.

3.1.1 Odvození difuzní rovnice s nelineární difuzivitou

Formulaci difuzní rovnice lze získat ekvivalentními úpravami výše zmíněné Richardsovy rovnice, kterou získáme dosazením Darcy-Buckinghamova zákona (3.1) do rovnice kontinuity (3.2). V následujícím textu podrobněji popíšeme odvození nelineární difuzivity, které je v publikaci [7] pouze naznačeno. Nejprve uvedeme výchozí tvar rovnic a po několika úpravách také odvozenou difuzní rovnici se speciálními tvary difuzivit, které byly v simulacích použity pro případ bentonitu a horniny.

Darcy-Buckinghamův zákon pro proudění v nesaturovaném prostředí a rovnice kontinuity mají následující tvar

$$\vec{q} = \frac{k \cdot k_r}{\mu} (\nabla p_l - \rho_w \cdot \vec{g}), \quad (3.1)$$

$$\kappa \frac{\partial p_l}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{q} = Q, \quad (3.2)$$

kde \vec{q} ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$) je Darcyovská rychlost, k (m^2) propustnost, μ ($\text{Pa} \cdot \text{s}$) dynamická viskozita, p_l (Pa) tlak ve vodě, ρ_w ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) hustota vody, \vec{g} ($\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$) tíhové zrychlení, κ (1) specifická storativita, Q zdroje a k_r (1) relativní propustnost, která je vyjádřena poměrem propustností za nesaturovaných a saturovaných podmínek. K vyjádření relativní propustnosti v závislosti na stupni saturace S_l se využívá mocninný zákon (pro bentonit uvažujeme podle [7] hodnotu parametru $\delta = 3$)

$$k_r(S_l) = (S_l)^\delta, \quad (3.3)$$

nebo v případě horniny vyjádření podle van Genuchtena, kde λ (1) je parametr z van Genuchten retenční křivky

$$k_r(S_l) = \sqrt{S_l} \left(1 - \left(1 - S_l^{\frac{1}{\lambda}} \right)^\lambda \right)^2. \quad (3.4)$$

Retenční křivka vyjadřující schopnost média zadržovat vodu při různé vlhkosti je použita podle van Genuchtena s parametry p_0 (Pa) a λ (1) a atmosferickým tlakem p_g (Pa) a je popsána následujícím vztahem

$$S_l(p_l) = \left(1 + \left(\frac{p_g - p_l}{p_0} \right)^{\frac{1}{1-\lambda}} \right)^{-\lambda} \quad (p_l < p_g). \quad (3.5)$$

Difuzní rovnice pro proudění vody v bentonitu má pak standardní tvar se stupněm saturace S_l jako neznámou veličinou

$$\frac{\partial S_l}{\partial t} = \nabla \cdot (D(S_l) \nabla S_l). \quad (3.6)$$

Uvedeme výsledek odvození difuzivity bentonitu $D_b(S_l)$, jehož postup je naznačen také v [7]

$$D_b(S_l) = \frac{k \cdot k_r(S_l)}{n \cdot \mu} \frac{dp_l}{dS_l} = \frac{k}{n \cdot \mu} \cdot S_l^3 dp_l(S_l). \quad (3.7)$$

Z inverze k retenční křivce podle van Genuchtena spočteme derivaci,

$$p(S_l) = p_g - p_0 \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{1-\lambda}, \quad (3.8)$$

$$dp(S_l) = \frac{d}{dS_l} p(S_l) = \frac{p_0}{\lambda} (1 - \lambda) \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}}, \quad (3.9)$$

kterou pak dosadíme do vztahu pro difuzivitu, která je funkcí stupně saturace a ta závisí na retenční křivce a mocninném zákonu pro relativní propustnost

$$D_b(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} S_l^3 \frac{p_0}{\lambda} (1 - \lambda) \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}}. \quad (3.10)$$

Difuzní rovnice s odvozenou nelineární difuzivitou má pro prostředí bentonitu následující tvar

$$\frac{\partial S_l}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\left(\frac{k}{n \cdot \mu} S_l^3 \frac{p_0}{\lambda} (1 - \lambda) \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}} \right) \nabla S_l \right]. \quad (3.11)$$

Určení difuzivity pro horninu $D_h(S_l)$ je analogické, liší se použitím vztahu pro relativní propustnost v závislosti na stupni saturace – pro horninu ho lépe vystihuje van Genuchtenův vztah. Formulace difuzivity pro horninu má následující tvar

$$D_h(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} \sqrt{S_l} \left(1 - \left(1 - S_l^{\frac{1}{\lambda}} \right)^\lambda \right)^2 \frac{p_0}{\lambda} (1 - \lambda) \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}}. \quad (3.12)$$

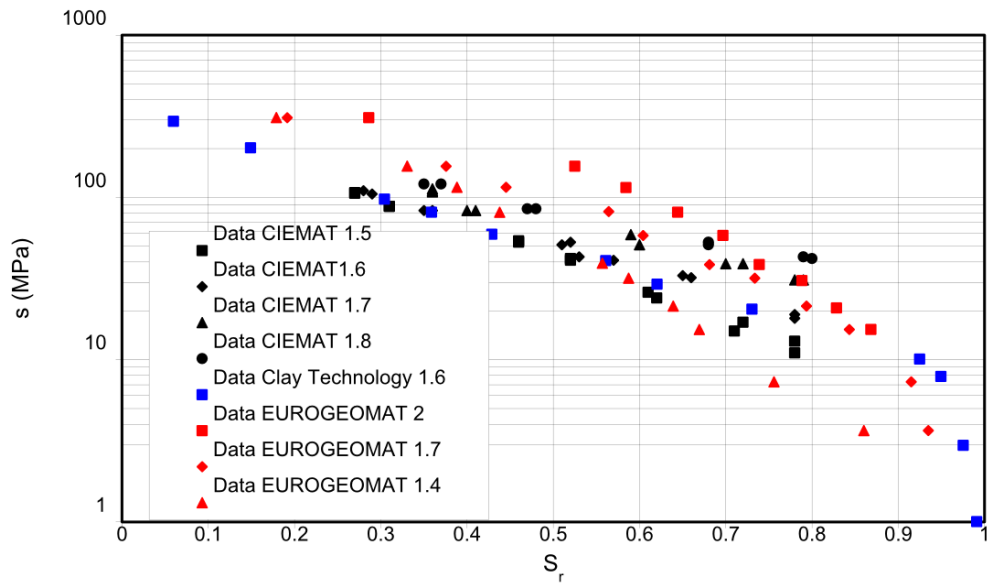
Pro úplnost uvedeme ještě kompletní difuzní rovnici pro horninu (která se ve stejném tvaru využívá i pro puklinu)

$$\frac{\partial S_l}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\left(\frac{k}{n \cdot \mu} \sqrt{S_l} \left(1 - \left(1 - S_l^{\frac{1}{\lambda}} \right)^\lambda \right)^2 \frac{p_0}{\lambda} (1 - \lambda) \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}} \right) \nabla S_l \right]. \quad (3.13)$$

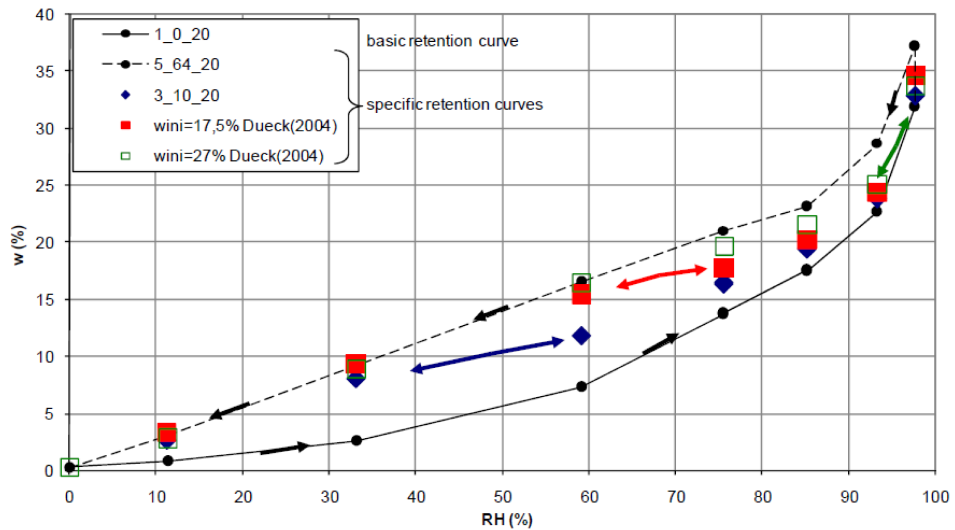
Retenční křivka

Retenční křivka patří mezi základní hydraulické charakteristiky částečně nasyceného prostředí, proto ji podrobněji popíšeme. Obecně retenční křivka vyjadřuje závislost mezi vlhkostním potenciálem (sacím tlakem) a objemovou vlhkostí, tzn. že vyjadřuje míru schopnosti zadržování vody při různé vlhkosti. Retenční křivka se určuje empiricky a obzvláště pro bentonit její tvar velice závisí na podmínkách, které jsou pro materiál typické (počáteční nasycení, forma a typ bentonitu, teplota atd.) [47]. Příklady retenčních křivek pro bentonit MX-80 pro různé objemové hustoty v suchém stavu jsou uvedeny na Obr. 3.1.

Retenční křivka se také vyznačuje hysterezí (různý průběh křivky pro saturaci a desaturaci), která obecně pro zeminy závisí na zrnitostním složení materiálu: u hrubozrnných materiálů může být významná, u jemnozrnných naopak zanedbatelná [19]. Příklad hystereze retenční křivky pro bentonit MX-80 je uvedena na Obr. 3.2.



Obr. 3.1: Experimentálně určené retenční křivky bentonitu typu MX-80 pro různé objemové hustoty v suchém stavu (vyjádřeny jako závislosti sacího tlaku s (MPa) na stupni saturace S_r (1), označení S_r v této práci odpovídá stupni saturace S_l), převzato z [47]



Obr. 3.2: Ukázka hystereze retenční křivky bentonitu MX-80, převzato z [7]

V simulacích nejčastěji využíváme retenční křivku navrženou podle [7], tzv. van Genuchten retenční křivku [66], kterou obecně můžeme vyjádřit pomocí následujícího vztahu

$$\theta_e(h) = \begin{cases} \frac{1}{(1+(-\alpha h)^n)^m} & h < 0 \\ 1 & h \geq 0 \end{cases}, \quad (3.14)$$

kde $\theta_e(h)$ ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$) označuje efektivní vlhkost (efektivní stupeň saturace), který lze určit pomocí dalších parametrů (objemová, nasycená a reziduální vlhkost). Pro potřeby této práce budeme uvažovat $\theta_e(h) = S_l$. Parametr h (m) vyjadřuje tlakovou výšku a α , n a m jsou parametry závislé na materiálu, kde m je obvykle popsán jako $m = 1 - \frac{1}{n}$, přičemž platí $n > 1$. Konkrétní tvar van Genuchten retenční křivky použité v simulacích s hodnotami parametrů je uveden v kapitole 3.1.1, vztah (3.5) a v kapitole 3.3 v Tab. 3.2.

Propustnost prostředí

Další charakteristikou reprezentující proudění v částečně nasyceném prostředí je propustnost prostředí. V provedených simulacích považujeme propustnost prostředí za konstantní veličinu a závislost na stupni saturace vyjadřujeme pomocí relativní propustnosti. Relativní propustnost je podle [19] bezrozměrná veličina, která vyjadřuje poměr propustností za nasycených a nenasyčených podmínek. V závislosti na typu materiálu (hornina, bentonit) jsou pro její vyjádření použity různé analytické vztahy: např. van Genuchtenův vztah, mocninný zákon atd.

Převod RH a tlaku vody

Při vyhodnocování výsledků simulací a porovnávání s naměřenými daty je v některých případech nutné provádět převody veličin. Pro převod mezi tlakem vody a stupněm saturace využíváme retenční křivku (3.5), mezi relativní vlhkostí (RH) a tlakem vody tzv. Kelvinův zákon, který je vyjádřen v následujícím tvaru

$$s(RH, T) = \frac{\ln(RH) \cdot \rho_w \cdot R \cdot (273,15 + T)}{M_w}, \quad (3.15)$$

kde $s(RH, T)$ (Pa) vyjadřuje sací tlak (rozdíl mezi tlakem vody a atmosferickým tlakem), R ($\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$) univerzální plynovou konstantu, M_w ($\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$) molární hmotnost vody.

3.2 Popis mechanického chování

Mechanické chování bentonitu v modelech popisujeme podle [40] s využitím experimentálních dat uvedených v [9]. Jedná se o elasto-plastický materiálový model, jehož vlastnosti se mění se změnou nasycení.

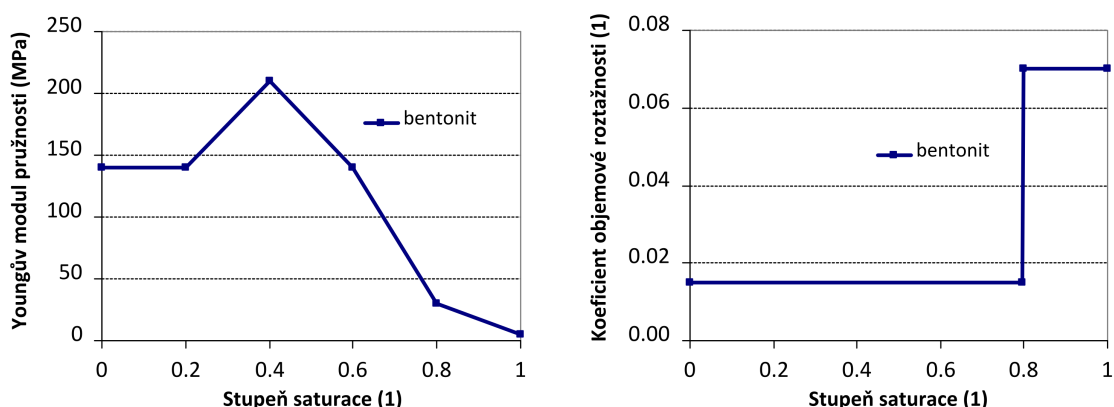
Řídící rovnici pro mechanické chování je Hookeův zákon spolu s rovnicemi rovnováhy a vztahem pro malé deformace mezi napětím a posunutím, standardně známé

vztahy např. podle [11]. Hodnota nelineárního Youngova modulu pružnosti (Obr.3.3) závisí na stupni saturace. Při stavu nasycení okolo 40 % je hodnota modulu pružnosti nejvyšší a následný výrazný pokles k nule popisuje „přepnutí do plastického stavu“ pro téměř plně saturovaný bentonit. Bobtnání následkem přísunu vody do bentonitu je vyjádřeno koeficientem objemové roztažnosti v bilineárním tvaru (3.16). Roztažnost bentonitu je rovněž závislá na stupni saturace a je zobrazena v grafu na Obr. 3.3 vpravo, kde je zřejmá skoková změna objemu při 80% nasycení.

Koeficient objemové roztažnosti β závisí na poměrné změně objemu bentonitu $\frac{V}{V_0}$ a změně obsahu vody $\Delta\omega$ podle vztahu

$$\beta = \frac{\frac{V}{V_0} - 1}{\Delta\omega}. \quad (3.16)$$

Výraz „plasticita“ bentonitu může obecně nabývat dvojího významu. Plasticitou lze mýlně mechanický stav, kdy dochází k nevratným deformacím – myšlen je tedy obecný pojem z klasické mechaniky. V některých případech je možné plasticitou bentonitu uvažovat pojem z mechaniky zemin, kde je jím míněn konzistenční stav materiálu. V práci uvažujeme první případ ve smyslu modelového vyjádření, který ale efektivními vlastnostmi reprezentuje reálné chování v druhém smyslu.



Obr. 3.3: Mechanické parametry bentonitu – Youngův modul pružnosti a koeficient objemové roztažnosti v závislosti na stupni saturace, převzato z [9] a z [40] a upraveno

3.3 Materiálové parametry použité v modelech

Materiálové parametry budou popsány podle navržených vztahů z experimentu BRIE – z takto definovaného materiálového modelu vycházíme ve většině provedených simulací. Pokud se v některých problémech materiálové vlastnosti liší (ať už pro přítomnost bentonitu v jiném počátečním stupni saturace, v jiné formě, stupni kompaktování), je tato skutečnost uvedena přímo v popisu řešení. Vždy je však

v modelech uvažován silně bobtnavý bentonit wyomingského typu MX-80, který byl v obou experimentech BRIE a Prototype Repository použit.

Většinu hodnot a závislostí materiálových parametrů týkající se materiálového modelu reprezentujícího bentonit v experimentu BRIE jsme převzali jako navržené vztahy a hodnoty z definice Task 8 [7]. Materiálový model pro bentonit aplikovaný v modelech Prototype Repository je také částečně převzatý z Task 8, částečně ze starších materiálů TF EBS (bentonit v tomto experimentu byl instalován v jiném počátečním stupni saturace).

3.3.1 Bentonit

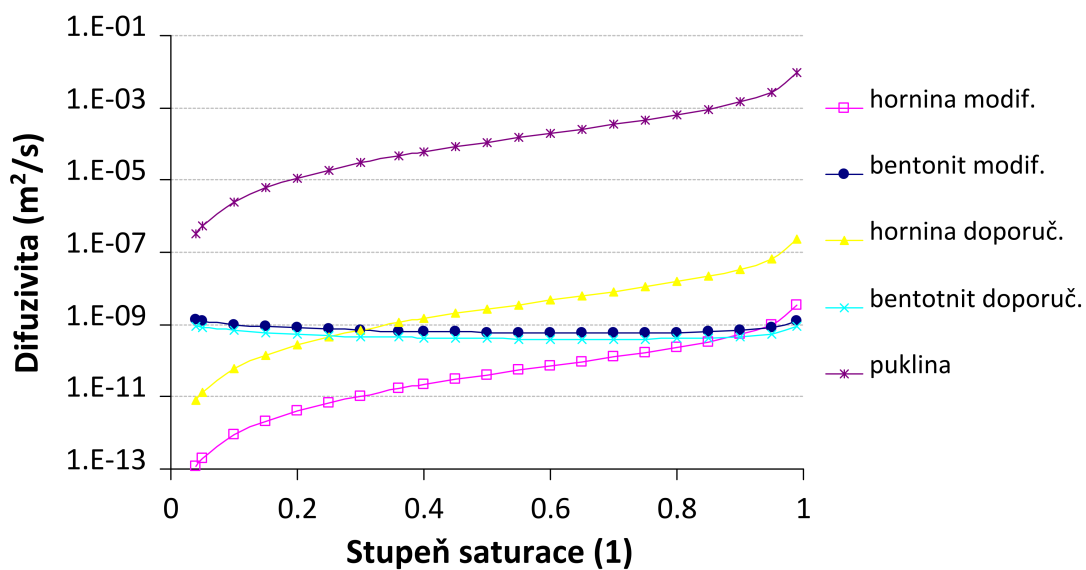
Podle dokumentace k úloze Task 8 [7] je počáteční hmotnostní obsah vody v bentonitu na úrovni 10 % a objemová hmotnost bentonitu při stavu plné saturaci $2000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Z těchto údajů lze jednoduchými přepočty (pokud uvažujeme hustotu vody $1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ a zdánlivou hustotu pevných částic bentonitu $2780 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$) určit hodnotu pórovitosti, čísla pórovitosti, počátečního stupně saturace a objemové hmotnosti suchého bentonitu, všechny veličiny jsou uvedeny v Tab. 3.1

Tab. 3.1: Počáteční hodnoty materiálových parametrů pro bentonit v experimentu BRIE, podle [7]

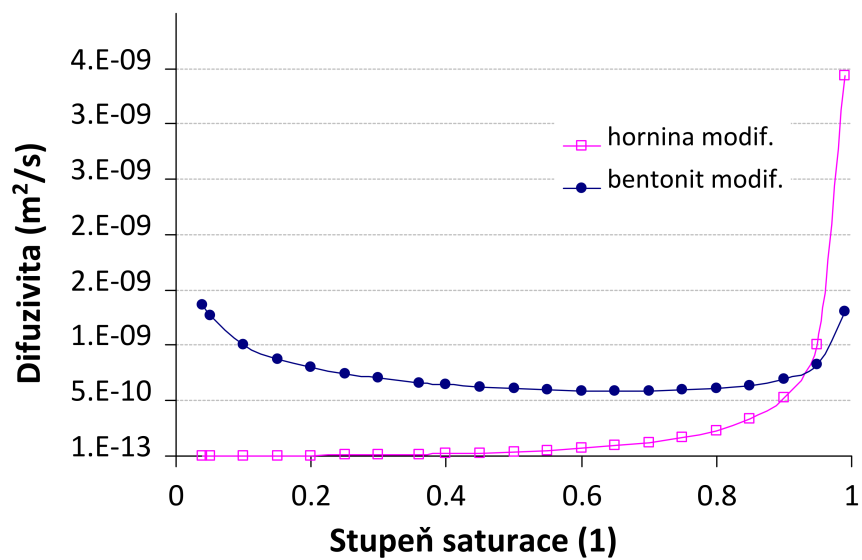
Parametr	Značka	Jednotka	Velikost
obsah vody v bentonitu (hmotnostní)	ω	%	10
stupeň saturace (nasycení)	S_l	%	36
pórovitost	n	1	0,438
číslo pórovitosti	e	1	0,78
hustota vody	ρ_w	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	1000
objemová hmotnost nasyceného bentonitu	ρ_m	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2000
objemová hmotnost suchého bentonitu	ρ_d	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	1560
zdánlivá hustota pevných částic bentonitu	ρ_s	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2780

Publikace [7] uvádí některé doporučené hodnoty parametrů pro bentonit. V testovacích výpočtech v kapitole 6 při kalibraci na referenční výpočet však byly v rámci této práce navrženy jiné – modifikované hodnoty propustnosti bentonitu, pro které byla dosažena vyšší shoda s referenčními výsledky. V Tab. 3.2 jsou uvedeny původní navržené hodnoty i hodnoty modifikované (pro úplnost uvádíme parametry jak pro bentonit, tak pro horninu a puklinu).

Grafy na Obr. 3.4 a Obr. 3.5 zobrazují závislosti difuzivity bentonitu na stupni saturace, které jsou získané dosazením parametrů z Tab. 3.2 do vztahů (3.10) nebo (3.12) v porovnání s difuzivitami horniny a pukliny. Na Obr. 3.4 jsou srovnány průběhy s doporučenými i modifikovanými parametry (tzn. parametry kalibrovanými na simulace [7]) v logaritmickém měřítku. Z grafu je patrné, že průběh difuzivity bentonitu se změnou parametrů pouze minimálně, průběhy pro horninu a puklinu mají shodný tvar posunutý ve směru osy y v závislosti na dosazené hodno-



Obr. 3.4: Difuzivita pro bentonit, horninu a puklinu v závislosti na stupni saturace, zobrazeny původní (doporučené) a modifikované průběhy v logaritmickém měřítku



Obr. 3.5: Difuzivita pro bentonit a horninu v závislosti na stupni saturace, zobrazeny průběhy s kalibrovanými hodnotami na výsledky [7]

tě propustnosti. Průběh pro horninu ve srovnání s bentonitem zase ukazuje výrazný nárůst difuzivity pro stupeň saturace blízky 100 %, viz Obr. 3.5.

Mechanické chování bentonitu vyjádřené pomocí elastického materiálu s nelineárním modulem pružnosti závislým na stupni saturace (Obr. 3.3) je popsáno výše v kapitole 3.2. „Plastické“ chování bentonitu reprezentuje pokles modulu pružnosti při vyšším stupni saturace. Dalším materiálovým parametrem je Poissonova konstanta, která je pro bentonit rovna hodnotě 0,3. Vztah mezi objemovou změnou bentonitu a stupněm saturace popisuje koeficient objemové roztažnosti (Obr. 3.3 vpravo), jenž při přibližně 80% nasycení skokově vzroste z hodnoty 0,015 na hodnotu 0,07. Velikosti jednotlivých parametrů popisujících mechanické chování bentonitu, spolu s parametry horniny a pukliny jsou uvedeny v Tab. 3.3.

Tab. 3.2: Materiálové parametry pro výpočet difuzivity pro bentonit, horninu a puklinu, p_0 , λ = parametry van Genuchten retenční křivky, k = propustnost (doporučená podle [7] nebo modifikovaná, která byla kalibrována na výsledky podle [7]), n = pórovitost, μ = dynamická viskozita vody

Materiál	p_0 (MPa)	λ (1)	$k_{dopor.}$ (m^2)	$k_{modifik.}$ (m^2)	n (1)	μ (Pa·s)
Bentonit	9,23	0,3	$6,4 \cdot 10^{-21}$	$9,5 \cdot 10^{-21}$	0,438	10^{-3}
Hornina	1,74	0,6	$6,0 \cdot 10^{-20}$	$9,0 \cdot 10^{-22}$	0,003	10^{-3}
Puklina	1,74	0,6	–	$2,5 \cdot 10^{-15}$	0,003	10^{-3}

Tab. 3.3: Hodnoty materiálových parametrů pro určení mechanického chování pro bentonit, horninu a puklinu

Materiál	Youngův modul pružnosti (Pa)	Poissonova konstanta (1)	Koef. objemové roztažnosti (1)
Bentonit	Obr. 3.3	0,3	Obr. 3.3
Hornina	$6 \cdot 10^{10}$	0,3	10^{-10}
Puklina	$6 \cdot 10^5$	0,3	10^{-10}

3.3.2 Horninová matrice

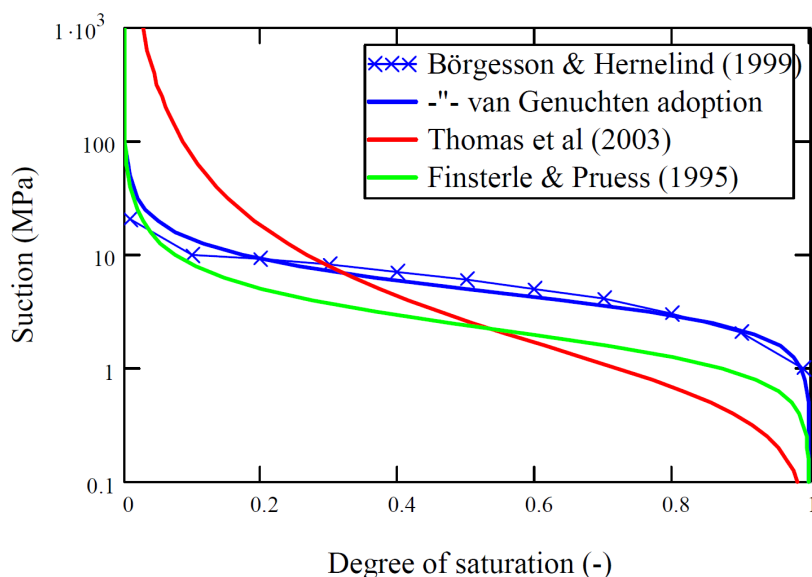
Horninová matrice je v modelech popisována jako ekvivalentní kontinuum s explicitně vyjádřenými puklinami s předpokládaným významným vlivem na simulovaný proces. Pokud je hostitelská hornina v modelu přímo zahrnuta, považujeme ji v počátečním čase simulace za plně nasycenou. Ale i přes tuto skutečnost je pro ni, stejně jako pro bentonit, použit shodný matematický popis pro proudění v částečně nasyceném prostředí pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou.

Propustnost hornin se např. podle [25], [49] nebo [73] v oblasti podzemní laboratoře v Äspö pohybuje v rozmezí 10^{-21} až $10^{-17} m^2$. Toto široké rozmezí závisí

hlavně na počtu a četnosti puklinových zón v místě, kde bylo prováděno měření. Např. „Matrix Fluid Chemistry Experiment“ [62] doporučuje hodnotu propustnosti přítomného dioritu $3 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ (měření založeno na hydraulické charakterizaci jádrových vrtů horninové matice pomocí helia). In situ injektážní testy většinou uvádějí vyšší hodnoty propustnosti (10^{-19} až 10^{-17} m^2). Příklad difuzních a hydraulických parametrů dioritu a žuly z lokality Äspö je uveden v příloze A (převzato z [49]).

Parametry retenční křivky pro horninovou matici byly převzaty z [7]. Stejně jako pro bentonit jsme modifikovali hodnotu propustnosti kalibrací na referenční výpočet, její hodnota je pak na dolní hranici doporučeného rozmezí. Horninová matice je poměrně homogenní a hodnotu pórovitosti uvažujeme na úrovni 0,3 %, což vyplývá z měření uvedených v [67] a [72]. Průběhy vybraných retenčních křivek pro horninu uvedených v [7] jsou pro ilustraci zobrazeny na Obr. 3.6.

Z mechanického hlediska považujeme horninu za elastické kontinuum s Youngovým modulem pružnosti o velikosti $6 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$ a Poissonově konstantě rovné 0,3. Je uvažována nulová objemová roztažnost horniny vlivem nasycení vodou, ale kvůli požadavkům výpočetního nástroje musela být nastavena hodnota různá od nuly, viz Tab. 3.3.



Obr. 3.6: Příklady retenčních křivek pro horninu z literatury, převzato z [7]

3.3.3 Pukliny

V případech, kde jsou v modelu obsaženy pukliny, jsou reprezentovány stejně jako hornina pomocí kontinua, které se liší materiálovými parametry od ostatních částí modelu. Matematický popis pro pukliny je shodný jako pro všechny ostatní části modelu a stejně jako u horninové matice je puklina již na počátku modelovaného procesu plně nasycená. Propustnost materiálu pukliny je v Tab. 3.2 uvedena o 7 řádů

vyšší než je propustnost horniny, ale testy na osově symetrických modelech v kapitole 6.4 ukázaly, že pokud je propustnost materiálu $100\times$ vyšší, nemá jeho další zvyšování na hydrataci bentonitu v uvedených modelech vliv, což bylo vyzkoušeno na 2D osově symetrickém modelu s puklinou a okolní horninou v kapitole 6.4.3.

Z mechanického hlediska je puklina, stejně jako horninová matrice, reprezentována elastickým spojitým materiálem s parametry podle Tab. 3.3. Poissonova konstanta a koeficient objemové roztažnosti jsou voleny stejně jako pro horninu, hodnota Youngova modulu pružnosti je o pět řádů nižší, než hodnota modulu pružnosti horniny, což vyjadřuje snazší deformovatelnost pukliny.

4 Metodika matematického modelování

V této kapitole krátce popíšeme přístupy k matematickému modelování v horninovém prostředí. Dále uvedeme numerickou metodu (metodu konečných prvků) a použítý výpočetní software ANSYS, ve kterém je implementována.

4.1 Přístupy k modelování v horninovém prostředí

Pro horninové prostředí, které se vyznačuje velkou nejistotou dat a parametrů, jsou numerické simulace vhodným nástrojem, jenž může posloužit k lepšímu porozumění probíhajícím procesům. V některých případech je lze použít i pro predikci chování, je však nutné mít stále na paměti, že model je pouze zjednodušením reality a nikdy nedovede proces popsat zcela komplexně. Přesto ale dokáže být užitečnou pomůckou při popisu a charakterizaci daného děje.

V horninovém prostředí se využívá několik přístupů k simulacím přírodních procesů. Hlavní rozdělení podle vyjádření horniny jako kontinua nebo diskontinua a nej-používanější metody jsou popsány v kapitole 2 a např. také v [41].

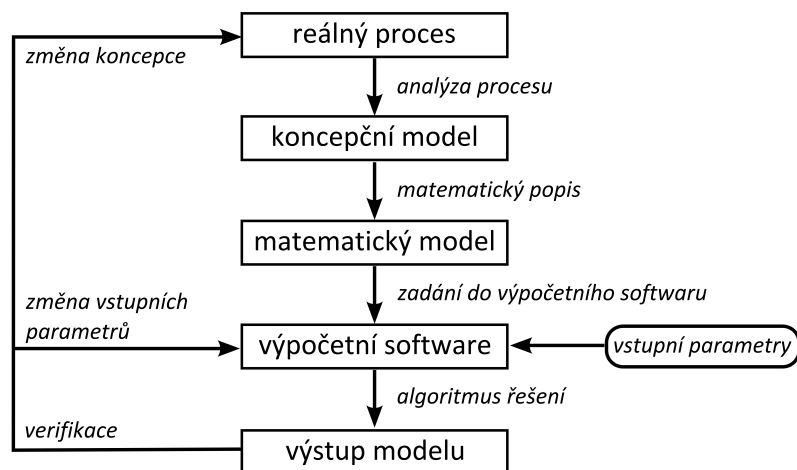
V simulacích provedených v rámci disertační práce přistupujeme k modelovanému médiu jako ke kontinuu, vyjádření puklin v hornině (případně jejich vlivu) se však liší v závislosti na typu simulovaného děje a požadovaných výstupech. Reprezentace jednotlivých simulovaných prostředí je následující:

- **bentonit:** kontinuum,
- **hornina:** kontinuum,
- **pukliny v hornině:** buď jako samostatné části kontinua se speciálními vlastnostmi, nebo je pouze zahrnut jejich vliv pomocí okrajové podmínky.

4.2 Postup při definování modelů

Postup při definici a výpočtu numerického modelu lze popsat několika fázemi, které jsou zobrazeny na Obr. 4.1. Tento postup se nevymezuje pouze na horninu se svými specifickými vlastnostmi, ve většině případů jej lze aplikovat na jakékoli uvažované prostředí. Podrobnější popis přístupů je popsán např. v [34], [30], nebo v [39].

Základní zásadou při modelování je postupovat od jednodušších případů a pokud fungují, model rozšířit a vytvořit složitější. V první fázi sestavování modelu je třeba stanovit účel modelu a cíl, jehož chceme použitím modelu dosáhnout. S výběrem



Obr. 4.1: Schematické znázornění postupu při definici a řešení modelu

účelu souvisí i pečlivé zvážení konkrétních procesů, které reálně probíhají a určení jejich podstaty. Je také nutné posoudit, jaké další důležité vlastnosti modelované procesy ovlivňují a není možné je zanedbat.

Klíčovou fází je výběr koncepce – tj. fyzikálního jevu, který určuje, co chceme modelem popsat a také další detaily, jenž jsou důležité a naopak ty, které můžeme zanedbat. Také vymezujeme časový rámec, v němž budeme úlohu řešit. V této fázi vybíráme i dimenzi řešeného problému a její případnou redukci a zjednodušení díky symetriím. Pro modely v horninovém prostředí je díky silné závislosti na měřítku důležitá volba tzv. reprezentativního elementárního objemu (REV), viz Obr. 4.2. Různá velikost REV ukazuje, že pokud je vybrán v příliš malém měřítku, převažují mikroskopické efekty, naopak při výběru příliš velkého měřítka se více projeví vliv větších nehomogenit, puklin apod.

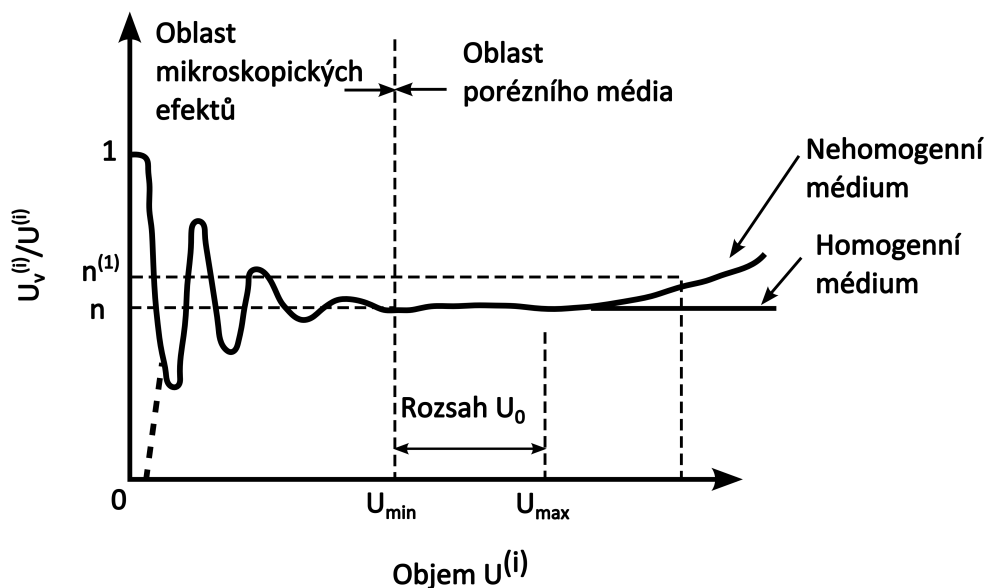
V další fázi pro fyzikální model stanovíme matematický popis – rovnice, které definují zákony, konstituční vztahy apod. V tomto kroku také stanovíme okrajové a počáteční podmínky potřebné při řešení. V našem případě řešíme parciální diferenciální rovnice a obzvláště při simulacích mechanických dějů v horninovém prostředí není vždy jednoduché okrajové podmínky určit.

Poté je třeba zformulovaný matematický model vyřešit pomocí simulačního nástroje. To zahrnuje výběr vhodné metody řešení, která je ve většině případů dána volbou simulačního programu. V tomto kroku také určíme potřebná vstupní data a parametry včetně jejich nejistot. Zvolíme optimálně jemnou síť a další nastavení závislá na typu úlohy. V simulacích uvažujících horninu je výběr dat důležitou fází, hlavně kvůli všeobecně problematické dostupnosti informací o horninovém prostředí. Je také nutné stanovit, zda podmínky, při kterých dané parametry platí, budou splněny i v modelových úlohách.

Po výpočtu je nezbytné simulované výstupy verifikovat, přičemž způsobů verifikace je několik. Můžeme např. zkontrolovat reálnost výsledků, využít porovnání

s experimentálními daty nebo parametry dostupnými z literatury, analyzovat změnu výstupů při změně vstupních dat atd. Pokud verifikace prokáže určité nesrovnalosti, je třeba zkontrolovat vstupní data, počáteční a okrajové podmínky a další nastavení, validovat navrženou koncepci oproti skutečně probíhajícímu procesu, případně model upravit a znovu jej vyřešit.

Při ověřování relevance modelu musíme brát v úvahu i chyby, kterých se při simulacích dopouštíme (samotná chyba modelu – např. při nahrazení kontinuem, chyba diskretizace, chyba numerické metody) a pokud je to možné, snažit se tyto chyby minimalizovat.



Obr. 4.2: Volba reprezentativního elementárního objemu v závislosti na měřítku úlohy (osa x reprezentuje zvolený reprezentativní objem, osa y porozitu média), převzato z [6] a upraveno

4.3 Numerická metoda – metoda konečných prvků

Existuje řada metod vhodných k numerickému řešení přírodních procesů v horninovém prostředí. Mezi nejčastěji využívané patří metoda konečných prvků (FEM), která je implementována v řadě softwarů, ať už v široce zaměřených multifyzikálních simulačních systémech: ANSYS [5], COMSOL Multiphysics [20], nebo ve specificky orientovaných výpočetních nástrojích: Code_Bright [53], FEFLOW [23], Connect-Flow [3], ISERIT [29] atd. Další typy běžně užívaných metod jsou uvedeny v kapitole 2.1. K simulaci modelů hydratace bentonitu v této práci využíváme metodu konečných prvků, která je implementována i v softwaru ANSYS – použitém výpočetním nástroji popsaném v následující kapitole.

Metodu konečných prvků zde popíšeme krátce a schematicky, protože se jejím popisem a analýzou zabývá velké množství publikací (ať už obecně, nebo se zaměřením na určitý typ problému). Uvedené informace čerpáme z [16] a z [74].

FEM byla poprvé představena již v roce 1943 v publikaci [21] a obecně slouží k numerickému řešení parciálních diferenciálních rovnic, kterými je možné popsat velké množství inženýrských, přírodních a dalších problémů.

FEM vychází z Galerkinovy metody, což je variační metoda, jejíž princip je založen na nahrazení řešené rovnice (tzv. silné formulace) její integrální formou (tzv. slabým řešením) a diskretizací slabého řešení, aproximací přesného řešení řešením přibližným, které se hledá v konečném počtu bodů. Díky rozdělení úlohy na konečný počet prvků je možné řešit problém v takřka jakémkoli tvaru výpočetní oblasti. Samotné řešení je získáno řešením soustavy algebraických rovnic v konečném počtu kroků, pomocí výpočetní techniky, kde se často s výhodou využívá tzv. řídkých matic, které kladou nižší nároky na paměť.

Vlivy okolního prostředí na zkoumaný objekt jsou určeny pomocí tzv. okrajových podmínek, stav objektu na počátku procesu pomocí podmínek počátečních (FEM umožňuje řešení jak ustálených, tak neustálených úloh).

4.4 Výpočetní software ANSYS

Pro výpočet všech uvedených simulací byl použit komerční výpočetní systém ANSYS [5] (akademická licence TUL), založený na metodě konečných prvků. Modely byly sestaveny částečně v grafickém rozhraní, částečně pomocí příkazů jazyka APDL (ANSYS Parametric Design Language), ale vždy byly v tomto jazyce (v textové podobě) uloženy pro následné modifikace modelů.

Základní proces, který řešíme ve všech úlohách je časově závislá hydratace bentonitu. Řídicí rovnice tohoto procesu má tvar difuzní rovnice s nelineární difuzivitou (parabolická parciální diferenciální rovnice) a je popsána v kapitole 3.1. V softwaru ANSYS byla jako konkrétní aplikace difuzní rovnice využita neustálená rovnice vedení tepla

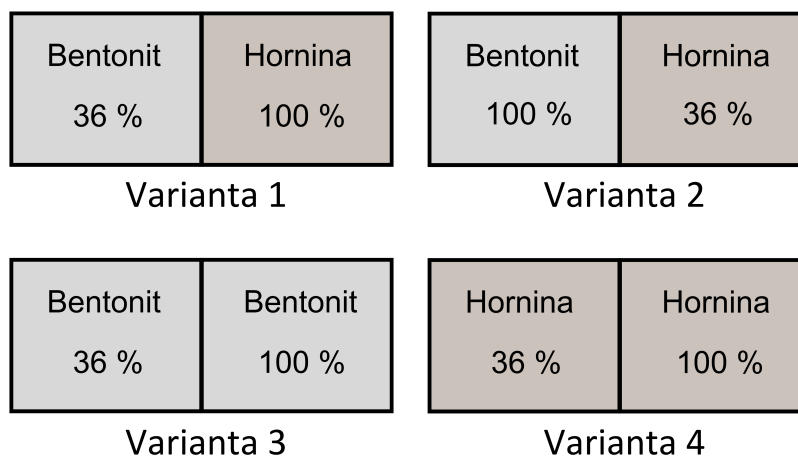
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{\gamma}{c\rho} \nabla T \right), \quad (4.1)$$

kde T (K) označuje teplotu, t (s) čas, γ ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) koeficient tepelné vodivosti, c ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) měrnou tepelnou kapacitu a ρ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) hustotu. Teplota T reprezentuje stupeň saturace S_t , člen γ difuzivitu $D(S_t)$, přičemž $c \cdot \rho = 1$. Difuzivita je závislá na stupni saturace a do simulačního nástroje je zadávána pomocí tabulky hodnot získaných ze vztahů (3.10), respektive (3.12) podle volby příslušného materiálu.

V případech sdružených HM modelů opět řešíme difuzní rovnici s nelineární difuzivitou společně s řídicími rovnicemi pro elasticitu s nelineárním modulem pružnosti podle kapitoly 3.2. Sdružení je realizováno koeficientem objemové roztažnosti a Youngovým modulem pružnosti závislými na stupni saturace [9] a [40], což je podrobněji popsáno také v kapitole 3.2.

5 Testovací úlohy pro modely s rozhraním bentonit-hornina

Bylo nadefinováno a simulováno několik jednoduchých testovacích úloh, které mají za úkol přiblížit základní vlastnosti procesu hydratace bentonitu v modelech s rozhraním dvou materiálů – bentonitu a horniny do dosažení rovnovážného stavu. Dále zkoumají případnou desaturaci uvažovaného prostředí na rozhraní materiálů a další vlastnosti procesu saturace bentonitu. Testovací problémy jsou řešeny za použití jednoduché geometrie v různých kombinacích materiálů a hodnot počátečního stupně saturace s využitím difuzní rovnice s nelineární difuzivitou (která je uvažována ve všech simulacích uvedených v této práci) a nahrazuje standardně používanou Richardsovu rovnici. Úlohy vychází z obdobných testovacích modelů řešených v bakalářské práci v softwaru FEFLOW [63], která se zabývá simulacemi hydratace bentonitu podle standardní Richardsovy rovnice. Práce byla vedena školitelem doktorandky, která osobně spolupracovala na formulaci a vyhodnocení, výsledky využívá pro porovnání vlastních výpočtů v rámci disertační práce.



Obr. 5.1: Řešené varianty modelů – různé kombinace materiálů (bentonit, hornina) a počátečních hodnot stupně saturace

5.1 Popis testovacích úloh

Geometrii modelových příkladů tvoří obdélník o šířce 5 m a výšce 2 m, přičemž uprostřed horizontálního rozměru se nachází vertikální rozhraní materiálů. Ve čtyřech variantách na Obr. 5.1 jsou uvažovány buď různé kombinace různě hydratovaného bentonitu a horniny, nebo shodný materiál s různým stupněm saturace:

- **varianta 1:** plně saturovaná hornina a bentonit saturovaný na 36 %,
- **varianta 2:** plně saturovaný bentonit a hornina saturovaná na 36 %,
- **varianta 3:** celý model tvořený bentonitem, vlevo saturovaným na 36 % a vpravo saturovaným na 100 %,
- **varianta 4:** celý model tvořený horninou, vlevo saturovanou na 36 % a vpravo saturovanou na 100 %.

Chování bentonitu je v modelech reprezentováno dvěma různě vyjádřenými variantami difuzivity závislými na stupni saturace, které jsou odvozeny pomocí postupu uvedeného v kapitole 3, kde byly definovány jednotlivé veličiny.

První vztah pro difuzivitu, který se pro bentonit standardně používá, je vyjádřen pomocí van Genuchten retenční křivky (3.5) s relativní propustností $k_r = S_l^3$, pro potřeby této kapitoly budeme variantu označovat „VG“, difuzivita má následující tvar

$$D_{b_{VG}}(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} \cdot S_l^3 \cdot \frac{p_0}{\lambda} (1 - \lambda) \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}}. \quad (5.1)$$

Druhá varianta difuzivity bentonitu je vyjádřena následujícím vztahem

$$D_{b_{SL}}(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} \cdot S_l \cdot 2 \cdot p_0, \quad (5.2)$$

a vychází z retenční křivky podle mocninného zákona

$$S_l(p_l) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{p_g - p_l}{p_0}}}, \quad (5.3)$$

která je v některých modelech také navrhována [1]. Velikost relativní propustnosti je dána vztahem $k_r = S_l^4$ a tato varianta je označena jako „SL“.

Difuzivita horniny taktéž vychází z van Genuchten retenční křivky, liší se odlišným vyjádřením relativní propustnosti (van Genuchtenův vztah podle (3.4)), výsledná difuzivita má tvar

$$D_h(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} \cdot \sqrt{S_l} \cdot \frac{p_0}{\lambda} \left(1 - \left(1 - S_l^{\frac{1}{\lambda}} \right)^\lambda \right)^2 (1 - \lambda) \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}}. \quad (5.4)$$

Konkrétní závislosti difuzivity pro bentonit i horninu s van Genuchten retenční křivkou byly odvozeny pomocí materiálových vlastností uvedených v Tab. 3.2 s modifikovanou propustností. Difuzivita (5.2) s retenční křivkou podle mocninného

zákonu je určena s hodnotou $p_0 = 19,7$ MPa podle [1], ostatní parametry jsou taktéž z Tab. 3.2.

Abychom vystihli proces, který probíhá bez vnějšího přístupu vody, je uvažována pouze voda přítomná v modelu na začátku děje podle stupně saturace jednotlivých médií. Na celé hranici modelu je zavedena okrajová podmínka nulového toku a počáteční saturace v daném materiálu je nastavena na hodnotu 36 % nebo 100 %, podle řešené varianty, viz Obr. 5.1.

Rovnováha se v řešených modelech ustálí až téměř po 1000 letech, je tedy simulována neustálená úloha s konečným časem $3 \cdot 10^{10}$ s.

5.2 Výsledky testovacích úloh

Průběh saturace jednoho média, případně desaturace média druhého, je sledován v závislosti na vzdálenosti od rozhraní v různých časových krocích (28,9 dne, 289,4 dne, 1,6 let, 7,9 let, 79,2 let, 158,5 let, 475,6 let a 951,3 let). Pro vyhodnocení je důležitý tvar křivky jak pro saturaci, tak desaturaci a zároveň porovnání výsledků pro oba typy uvažovaných retenčních křivek bentonitu.

Obr. 5.2 uvádí závislosti stupně saturace na horizontální vzdálenosti v reprezentativním čase 8 let pro výše uvedené varianty podle Obr. 5.1 pro oba materiálové modely bentonitu (VG a SL). V případě van Genuchten retenční křivky pro bentonit a horninu dochází ve variantě 1 ke „skokové“ desaturaci se vzdáleností od rozhraní, saturace bentonitu probíhá naopak pozvolněji, křivka není tak strmá. Je zde patrná schopnost horniny uvolnit větší množství vody, než je v čase bentonit schopen přijímat. Ve variantě 2, kde je na počátku procesu plně saturovaný bentonit a postupně se z něj voda transportuje do horniny, jsou křivky téměř středově symetrické. To ukazuje na poměrně vyrovnaný příjem vody horninou s výdejem z bentonitu.

Varianta 3, podobně jako varianta 2, ukazuje téměř středově symetrický průběh procesu v bentonitu a v případě varianty 4 (obsahující pouze horninu) je vidět strmější odsaturování pravé poloviny modelu blízko rozhraní a celkově pozvolnější hydratování levé poloviny modelu, z čehož je možné usoudit, že saturace je rychlejší u rozhraní různě saturovaného materiálu a déle trvá, než se vlhkost dostane dále od rozhraní.

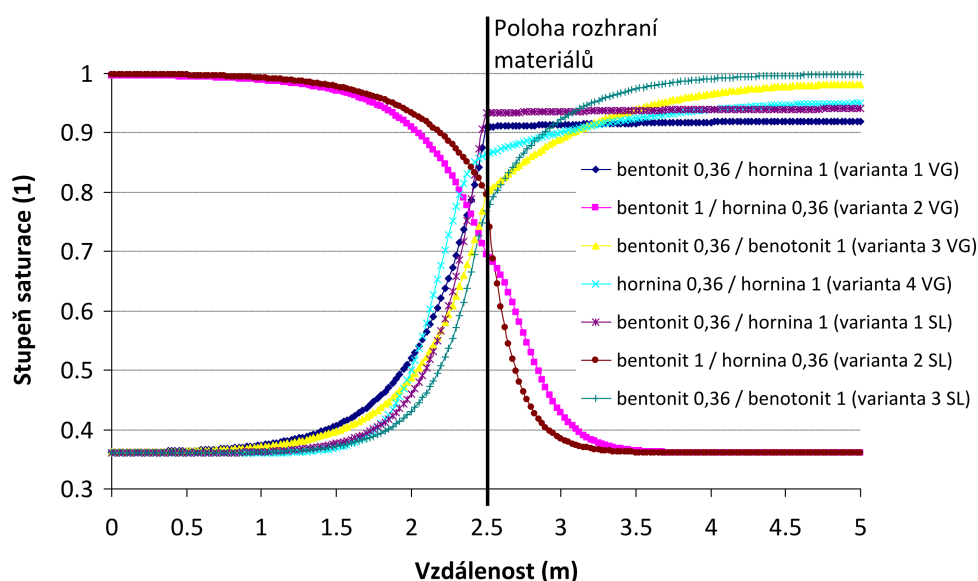
Vliv retenční křivky podle mocninného zákona pro bentonit na začátku sledovaného časového úseku (do času 1,6 let) nevykazuje žádné výraznější rozdíly, což je patrné při porovnání modelů s oběma uvažovanými retenčními křivkami pro bentonit ve variantě 1 na Obr. 5.3. V dalších zobrazených krocích se bentonit, případně hornina, v porovnání s případy van Genuchten retenční křivky saturuje pomaleji (tím pádem se i na druhé straně hornina či bentonit pomaleji odsaturovává). Nejvýraznější rozdíly jsou v časovém rozmezí 7,9 let a 47,6 let. Ke konci procesu (ve stavu blízko rovnováhy) se křivky zase přibližují, ale je vidět stejný trend jako v předchozích krocích, ale s méně výraznými rozdíly.

5.3 Vyhodnocení

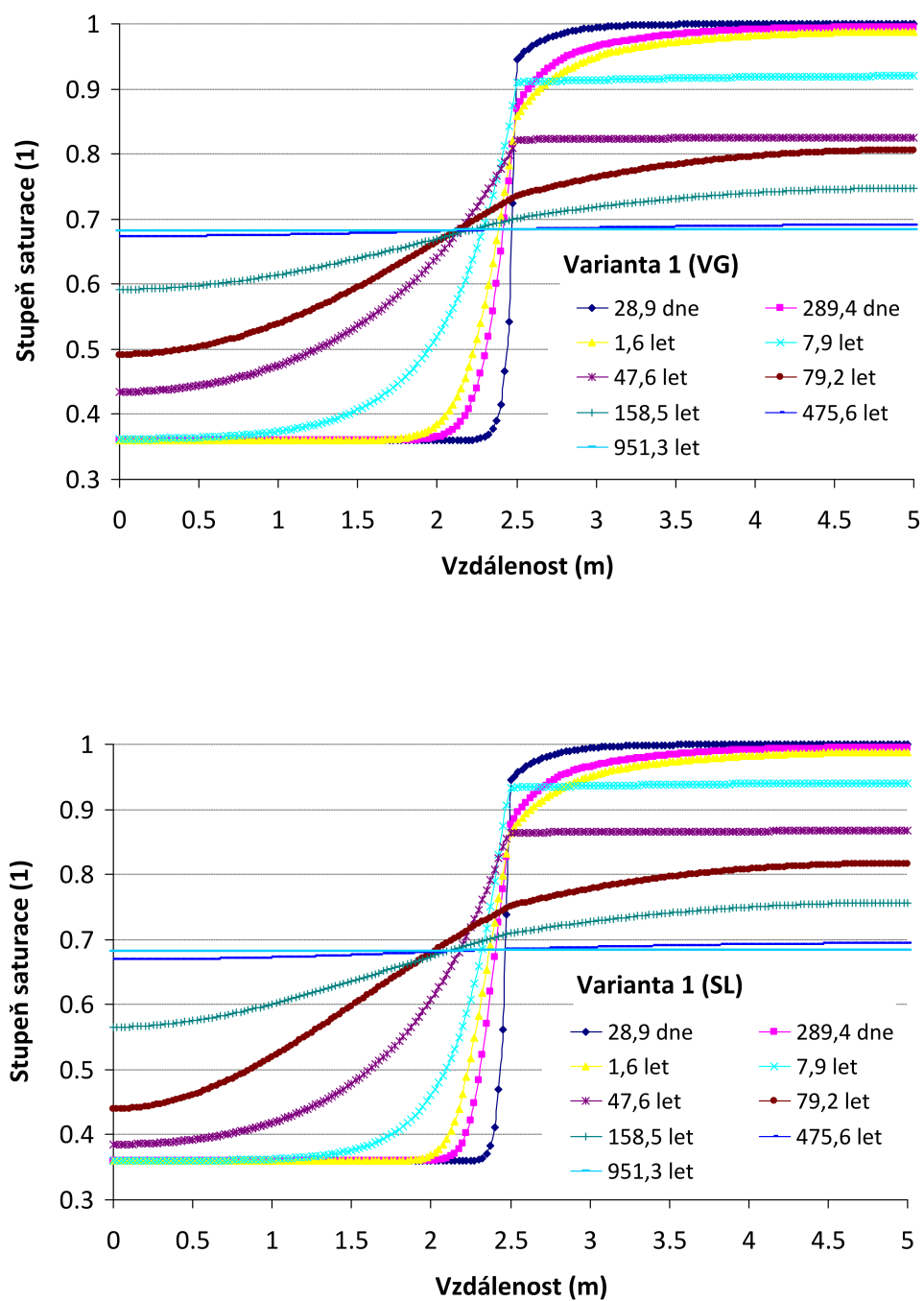
Testovací modely simulované v několika variantách s dvěma různě definovanými retenčními křivkami pro bentonit popisují v základních rysech proces postupné hydratace bentonitu.

Porovnání dvou použitých retenčních křivek pro bentonit ukazuje, že na počátku probíhá hydratace obdobně, výraznější rozdíly se projeví až v pozdějších časových krocích, kdy je sycení pro variantu s van Genuchten retenční křivkou rychlejší než pro variantu s retenční křivkou podle mocninného zákona. Ve stavu blízkém rovnováze se průběhy pro obě retenční křivky opět přibližují bez výraznějších odlišností.

Modely také ukázaly, že v případech, kdy je hornina více saturovaná než bentonit (případ, který se předpokládá při uložení VJP do HÚ), je na průbězích patrné dostatečné množství vody v hornině blízko rozhraní dostupné pro sycení bentonitu. Bentonit jej ale není schopen přijímat tak rychle, jak jej hornina uvolňuje. Modely tedy prokázaly, že limitujícím faktorem při procesu saturace je v uvedených případech rychlost přijímání vody bentonitem a rychlost transportu vody v rámci tohoto média.



Obr. 5.2: Vývoj horizontálních profilů stupně saturace v čase 8 let pro řešené varianty testovacích modelů obsahujících bentonit nebo horninu s počáteční saturací 36 % nebo 100 %, (VG – van Genuchten retenční křivka bentonitu, SL – retenční křivka bentonitu podle mocninného zákona)



Obr. 5.3: Vývoj horizontálních profilů stupně saturace v čase pro model obsahující nalevo bentonit s počáteční saturací 36 % a napravo horninu s počáteční saturací 100 % (nahore: varianta 1, retenční křivka bentonitu podle van Genuchtena (VG), dole: varianta 1, retenční křivka bentonitu podle mocninného zákona (SL))

6 Modelování hydratace bentonitu podle experimentu BRIE

Tato studie navazuje na experiment „Bentonite Rock Interaction Experiment“ (BRIE) v podzemní laboratoři v Äspö v hydrogeologických podmínkách plánovaného HÚ. Hlavním úkolem experimentu a následně i simulovaných modelů je popis interakcí na rozhraní bentonitu a horniny za konstantní teploty a bez monitorování mechanických veličin. Zároveň poskytuje naměřená data vhodná k porovnání s výsledky simulací. Experiment BRIE je podrobněji popsán v kapitole 6.1.

Další kapitoly obsahují několik různých modelů: jako úvodní simulace je představen model laboratorního experimentu Water Uptake Test, který doplňuje experiment BRIE a popisuje rovnoměrné sycení bentonitu na malém válcovém vzorku. Navazují další testovací simulace vztahující se přímo k in situ experimentu BRIE, kde je uvažován nehomogenní přítok vody. Tyto modely nejprve uvažují pouze hydrataci – sycení bentonitu v jednoduchých 1D a 2D osově symetrických geometriích, poté je použita složitější geometrie ve 3D se skutečnou polohou puklin umožňující přístup vody k bentonitu. Nakonec je přidán také vliv mechaniky – bobtnání bentonitu při jeho sycení.

Modely byly řešeny s různě vyjádřenými okrajovými podmínkami pro sycení bentonitu, které jednak simulují neomezený zdroj, jednak zdroj vody, jehož velikost závisí na stupni saturace. Jsou uvažovány modely v různých měřítkách, díky čemuž je možné proces saturace vystihnout z více úhlů pohledu a popsat hydrataci jak z lokálního, tak globálního hlediska.

Bentonit je v této práci saturován buď bodovým přítokem, nebo přítokem ve tvaru linie popisující průnik reálné pukliny s povrchem uvažovaného vrtu a v některých případech také celým rozhraním hornina-bentonit. Snažíme se popsat chování bentonitu při nehomogenní a nerovnoměrné hydrataci, která přináší další netriviální vlastnosti, jež se ve výše uvedených jednodušších případech neprojeví (určení polohy přítoků, nejistoty parametrů okolního horninového prostředí atd.).

Použitá koncepce a její hlavní vlastnosti a přínosy budou popsány níže, vycházíme ale z popisu procesu hydratace pomocí proudění v částečně saturovaném prostředí pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou, viz kapitola 3.1. V simulacích navazujících na experiment BRIE neuvažujeme žádné další fyzikální nebo chemické vlivy na hydrataci bentonitu.

Dílčí zadání úloh (resp. jejich úvodních etap) jsou uvedeny v [7], kde jsou kromě toho prezentovány i úvodní výpočty (tzv. „scoping calculation“). Tyto simulace jsou provedené jednak v softwaru Code_Bright v2.2 [53], jednak pomocí analyticky

kého řešení 1D lineární difuze, s kterými jsme v počátečních fázích výsledky modelů porovnávali a pomocí nichž jsme prováděli kalibrace materiálových parametrů. Model implementovaný v nástroji Code_Bright využívá k popisu hydratace obecnou bilanční rovnici pro vícefázové proudění (bilance vody v kapalně a plynné fázi), k přenosu kapalně vody dochází převážně díky Darcyho proudění, k přenosu vodní páry hlavně difuzí.

V této kapitole jsou popsány i některé rozšiřující simulace (sdružené HM modely ve 3D), které volně navazují na experiment BRIE, na jeho popis a účel, ale nejsou v rámci modelování experimentu BRIE v TF EBS definovány.

6.1 Popis experimentu Bentonite Rock Interaction Experiment (BRIE)

Bentonite-Rock Interaction Experiment (BRIE) je jeden z experimentů probíhajících v podzemní laboratoři v Äspö ve Švédsku v hloubce 420 m. Zabývá se výzkumem procesů a interakcí na rozhraní bentonitu a horninového prostředí. Obsahuje vrtý vyplněné bentonitem (bez kanystru) s menším průměrem než se předpokládá v HÚ.

Experiment BRIE studuje proces hydratace se zaměřením na detailní popis na rozhraní hornina-bentonit. Neorientuje se na mechanické chování a mění se teplotu, ale snaží se vystihnout hydraulické podmínky s vlivem přítoku vody konkrétními puklinami (s nízkou transmisivitou) a okolní homogenní horninovou maticí [7] a [15]. Tunel s vrtý experimentu BRIE a hlavními puklinami je zobrazen na Obr. 6.1 (jedná se o čtyři menší vrtý umístěné na pravém obrázku v levé části). Mezi hlavní úkoly experimentu patří:

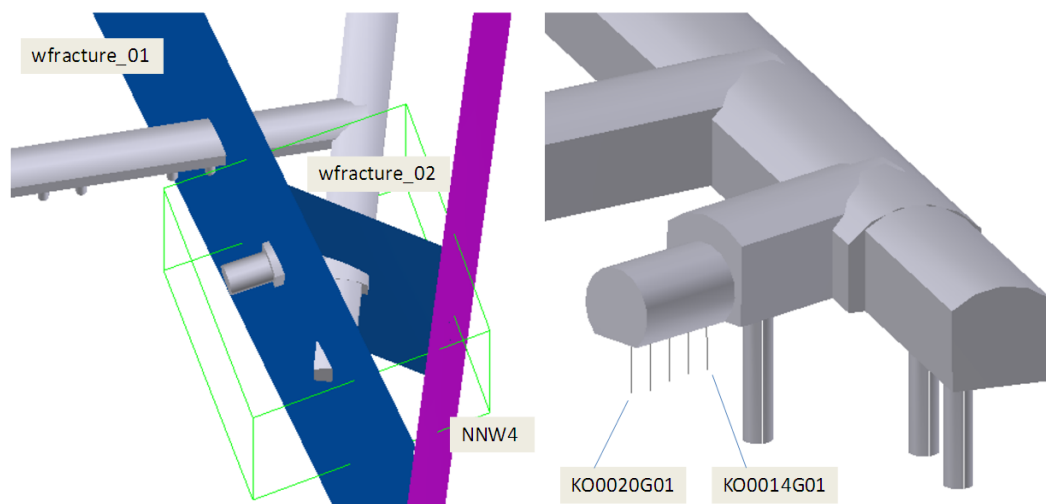
- dodání podkladů k popisu a porozumění procesu výměny vody na rozhraní bentonitu a horniny,
- zajištění lepších predikcí pro průběh hydratace bentonitu v rámci HÚ,
- zdokonalení metod pro charakterizaci ukládacích vrtů pro kanystr.

BRIE probíhá ve dvou hlavních fázích, první popisuje výběr a charakteristiku testovací lokality (charakteristika horninového prostředí a vrtů, mapování diskontinuit, měření přítoků atd.). Tyto informace dále slouží pro výběr dvou centrálních vrtů, které jsou předmětem podrobnějšího zkoumání. Druhá fáze se zabývá instalací bentonitového bufferu, samotným průběhem experimentu a poté i extrakcí bentonitu a zpracováním naměřených dat.

Experiment BRIE tvoří součást projektu TF EBS, na kterém se podílí také pracoviště TUL (souvislost s projektem je uvedena v úvodu práce). Jedná se konkrétně o modelování úlohy Task 8, na kterou navazuje i tato práce. Task 8 si klade podobné cíle jako experiment BRIE, mezi nejdůležitější patří vědecké porozumění procesu výměny vody na rozhraní bentonit-hornina.

V rámci BRIE byl proveden i experiment v laboratorních podmínkách nazvaný „Water Uptake Test“. Motivací k jeho definici byla validace materiálového modelu bentonitu, ale také porovnání simulačních nástrojů jednotlivých týmů v rámci

TF EBS. Jeho podrobnější popis a související simulace spolu s porovnáním výsledků vybraných výzkumných skupin jsou uvedeno v následující kapitole a další informace ve zprávě [91] a v [1].



Obr. 6.1: Tunel s vrty v experimentu BRIE s hlavními puklinami, dva z vrtů jsou označeny „KO0020G01“ a „KO0014G01“ převzato z [7] a upraveno

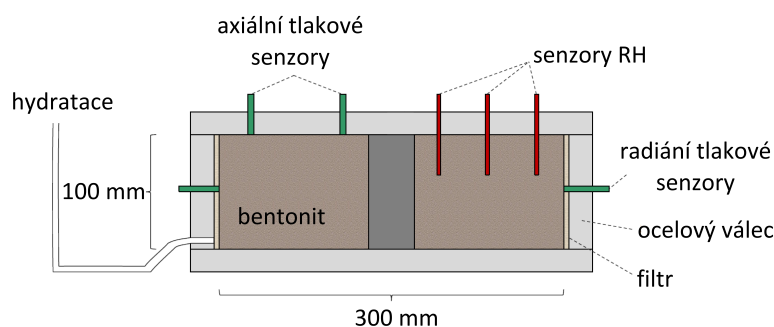
6.2 Modelování experimentu Water Uptake Test

Laboratorní experiment Water Uptake Test nepřímo navazuje na in situ experiment BRIE – doprovází úlohu Task 8 v projektu TF EBS. Má za úkol poskytnout data k přesnějšímu vyjádření a popisu hydraulických procesů v bentonitu v experimentu BRIE, případně také k validaci materiálového modelu a porovnání dosažených výsledků jednotlivých skupin spolupracujících na projektu TF EBS.

Na této úloze bylo provedeno ověření přístupu prezentovaného v této práci a výsledky modelů získané softwarem ANSYS byly porovnány s dalšími dvěma softwary, viz [91].

6.2.1 Popis experimentu Water Uptake Test

Experiment byl proveden na válcovém vzorku kompaktovaného bentonitu MX-80 se shodnými vlastnostmi a odpovídajícím radiálním rozměrem jako bentonit ve vrtech experimentu BRIE. Bentonitový blok byl instalován v ocelovém válci s plastovým filtrem po celém vnějším obvodu, aby byl zajištěn volný přístup vody k bentonitu a jeho rovnoměrné sycení (Obr. 6.2). V celém zařízení je také několik senzorů na měření charakteristických veličin souvisejících s hydratací bentonitu (relativní vlhkost, teplota, radiální a osový tlak).

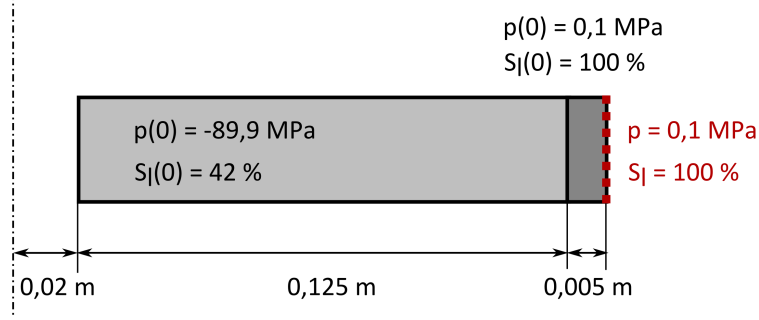


Obr. 6.2: Schematické znázornění experimentu Water Uptake Test

Celý test byl proveden třikrát, přitom dvakrát s neomezeným přístupem vody po dobu 100 a 200 dnů a jednou po dobu 100 dnů s omezeným přístupem vody. Popis experimentu a další podrobnosti k jeho provedení jsou uvedeny v [1].

6.2.2 Popis modelu

Simulujeme proces hydratace bentonitového bloku s využitím koncepce s nelineární difuzivitou závislou na stupni saturace. Ze zadání vyplynuly čtyři různé modelové případy (Tab. 6.1) lišící se ve variantě retenční křivky a vztahu pro relativní propustnost. Difuzivity jednotlivých variant jsou odvozené podle postupu uvedeného v kapitole 3 z retenčních křivek a relativních propustností podle Tab. 6.1. Každá



Obr. 6.3: Geometrie a okrajové podmínky pro osově symetrický model podle experimentu Water Uptake Test

difuzivita vyjadřuje jiný tvar závislosti – difuzivita s retenční křivkou podle mocninného zákona v jednom případě odpovídá konstantě, v případě druhém má tvar přímky. Difuzivita odvozená z van Genuchten retenční křivky s relativní propustností $k_r = S_l^3$ odpovídá tvaru, který bude použit i v simulacích experimentů BRIE a Prototype Repository.

Model experimentu je tvořen 2D osově symetrickou geometrií o šířce 13 cm a výšce 10 cm, která je posunutá o 2 cm od osy symetrie a reprezentuje řez dutým válcem, viz Obr. 6.3. Model by bylo možné simulovat i v 1D osově symetrické geometrii, ale kvůli názornosti popisu i výsledků simulací je model popsán jako 2D problém.

Materiálové vlastnosti jsou shodné pro celou oblast, liší se počáteční hydratace modelu – poslední 0,5 cm od vnějšího obvodu válce uvažujeme jako plně saturovaný, čemuž odpovídá tlak vody 0,1 MPa (tato počáteční podmínka reprezentuje počáteční vyplnění vnější mezery vodou). Na zbylé části modelu je předepsána počáteční podmínka odpovídající $S_l = 42 \%$. Výpočet byl proveden jako nestacionární úloha do času 203 dní s časovým krokem 1 den na 2D výpočetní síti s čtvercovými elementy o délce strany 2 mm.

Tab. 6.1: Definice materiálových modelů pro bentonit pro různé retenční křivky a relativní propustnosti v simulacích experimentu Water Uptake Test, VG označuje retenční křivku podle van Genuchtena, SL podle mocninného zákona a k_r relativní propustnost

Varianta	k_r	Difuzivita	Další parametry
VG	$(S_l)^3$	$D(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} \cdot (S_l)^3 \cdot \frac{P_0}{\lambda} \cdot (1 - \lambda) \cdot \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} \cdot S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}}$	$P_0 = 10 \text{ MPa}$
	$(S_l)^4$	$D(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} \cdot (S_l)^4 \cdot \frac{P_0}{\lambda} \cdot (1 - \lambda) \cdot \left(S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} \cdot S_l^{\frac{-1-\lambda}{\lambda}}$	$\lambda = 0,28$
SL	$(S_l)^3$	$D(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} \cdot 2 \cdot P_0$	$P_0 = 19,3 \text{ MPa}$
	$(S_l)^4$	$D(S_l) = \frac{k}{n \cdot \mu} \cdot S_l \cdot 2 \cdot P_0$	

6.2.3 Porovnání výsledků s naměřenými daty

Výsledky simulací pro uvedené materiálové modely jsme porovnali s naměřenými daty. K dispozici byly také vynesené grafy s jednotlivými veličinami vypočítané softwarem Code_Bright, dodané společně se zadáním modelových úloh [1]. V simulacích jsme sledovali zvláště následující veličiny:

- rozložení **stupně saturace** v závislosti na radiální vzdálenosti v čase 107 a 203 dnů,
- časový průběh **relativní vlhkosti** ve vzdálenostech 4, 8 a 12 cm od osy modelu (v modelech je relativní vlhkost přepočítána z tlaku vody získaného pomocí inverze k retenční křivce (3.8) a pak dále pomocí Kelvinova vztahu (3.15), více v postupu uvedeném v kapitole 3.1,
- **kumulativní objem vody** v modelu v závislosti na čase, přičemž objem je uvažován pro válec o výšce 0,1 m podle geometrie experimentu.

Ve všech případech platí, že proces hydratace bentonitu v modelech probíhá rychleji oproti naměřeným průběhům. Větší shoda stupně saturace resp. relativní vlhkosti s naměřenými hodnotami byla dosažena v pozdějších časech, kdy modely vykazovaly vyšší nasycení, ale také v místech, která jsou více vzdálena od osy symetrie modelu. Výše uvedené ale neplatí pro kumulativní objem vody, kde se postupně sčítá přitéklé množství vody, tudíž se sčítá i celková chyba, viz Obr. 6.4. Shoda v pozdějších časech je naopak nejlépe vidět v časových průbězích relativní vlhkosti ve vzdálenosti 12 cm od osy symetrie na Obr. 6.5.

Pro sledovaný časový průběh relativní vlhkosti ve vzdálenostech 4, 8 a 12 cm od osy modelu (Obr. 6.5) a radiální rozložení saturace (Obr. 6.6) se s naměřenými daty nejvíce shodují výsledky modelu s materiálovým modelem s použitou retenční křivkou podle mocninného zákona (označeno jako „SL, $k_r = S_l^4$ “). V průbězích kumulativního objemu vody na Obr. 6.4 se nejméně liší závislosti získané z modelů ve variantě „VG, $k_r = S_l^4$ “.

Data jsme porovnali i s výsledky uvedenými v [1] provedenými v Clay Technology softwarem Code_Bright. Na ilustračních grafech na Obr. 6.8 jsou srovnány vybrané průběhy ze softwaru Code_Bright s naměřenými daty pro variantu „VG, $k_r = S_l^3$ “. Uvedena je varianta, kde se výsledky v nejvyšší míře liší – celkově vychází vyšší kumulativní objemy v jednotlivých časových krocích. Výsledky se však poměrně dobře shodují u radiálního rozložení saturace a také pro průběhy relativní vlhkosti v závislosti na čase. Celkově je také patrný obdobný tvar křivek ve srovnání se simulovanými průběhy ze softwaru ANSYS na Obr. 6.5 a Obr. 6.6.

Z kontrolních důvodů bylo provedeno i porovnání výsledků s výstupy získanými dalšími dvěma softwary. Nejprve softwarem COMSOL Multiphysics [20], kde bylo srovnání úspěšně provedeno na jiných úlohách a díky shodnému tvaru difuzní rovnice se výsledné průběhy nelišily od závislostí ze softwaru ANSYS.

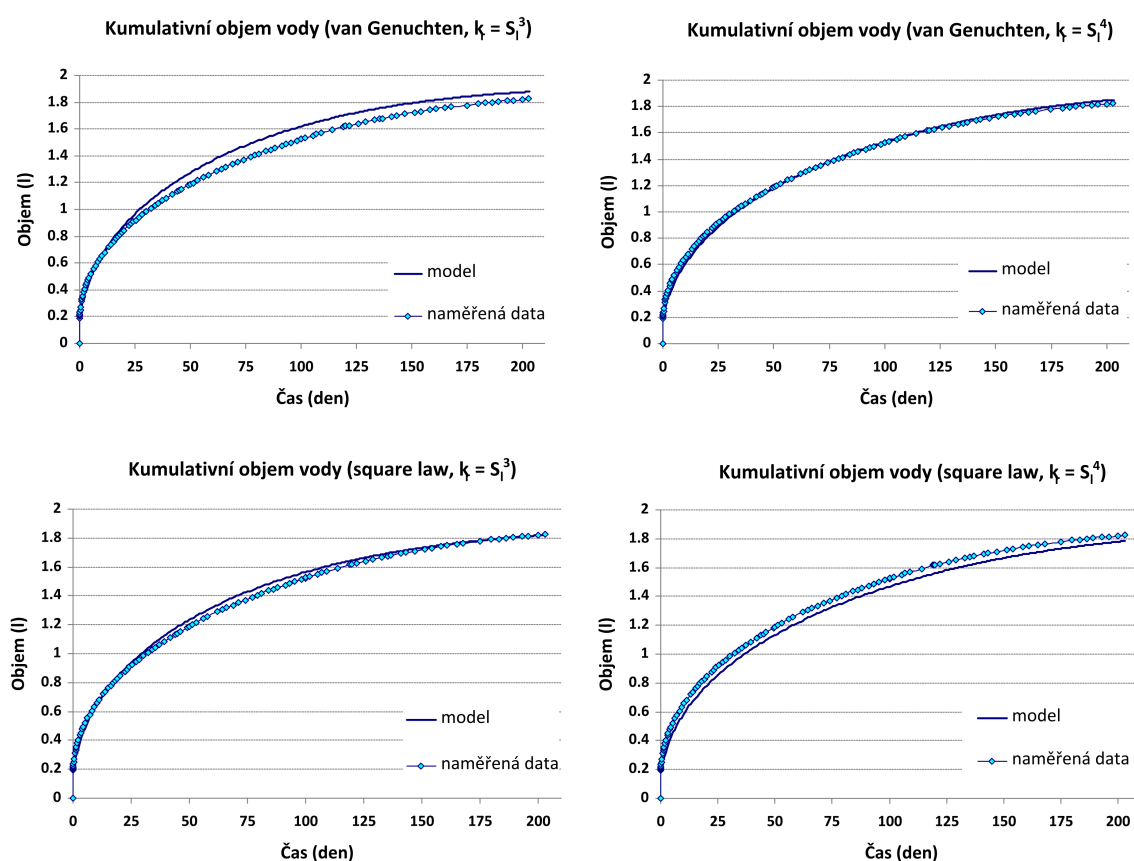
Další porovnání jsme provedli pomocí softwaru ISERIT [29] pro výpočet transportu tepla a vlhkosti, kde bylo využito difuzní rovnice. Byla zde však nutná transformace parametrů (konkrétně jsme využili rovnici pro transport vlhkosti prostřed-

nictvím vodní páry, kde stupni saturace odpovídal parametr $CaRel$). Zde jsme zaznamenali také poměrně dobrou shodu, vyšší rozdíly se objevily na počátku procesu, ale i tak nepřekročily 4 %. Porovnání vybraných veličin pro variantu „VG, $k_r = S_l^3$ “ je uvedeno na Obr. 6.7.

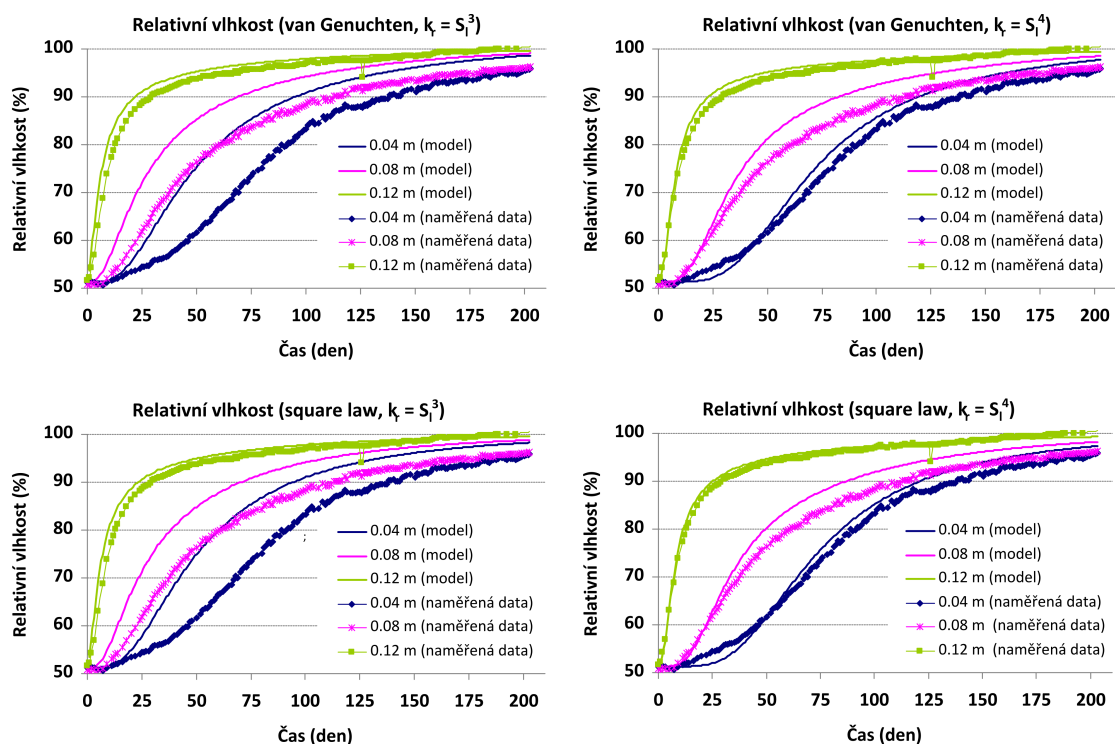
6.2.4 Vyhodnocení

Simulace laboratorního experimentu Water Uptake Test měla za úkol verifikovat použité modely s důrazem na volbu konstitučního vztahu v materiálovém modelu, který je využit při modelování experimentu BRIE. V modelech byly použity čtyři různé materiálové modely lišící se tvarem retenční křivky a vyjádřením relativní propustnosti. Navíc byly porovnány simulované výsledky s naměřenými daty.

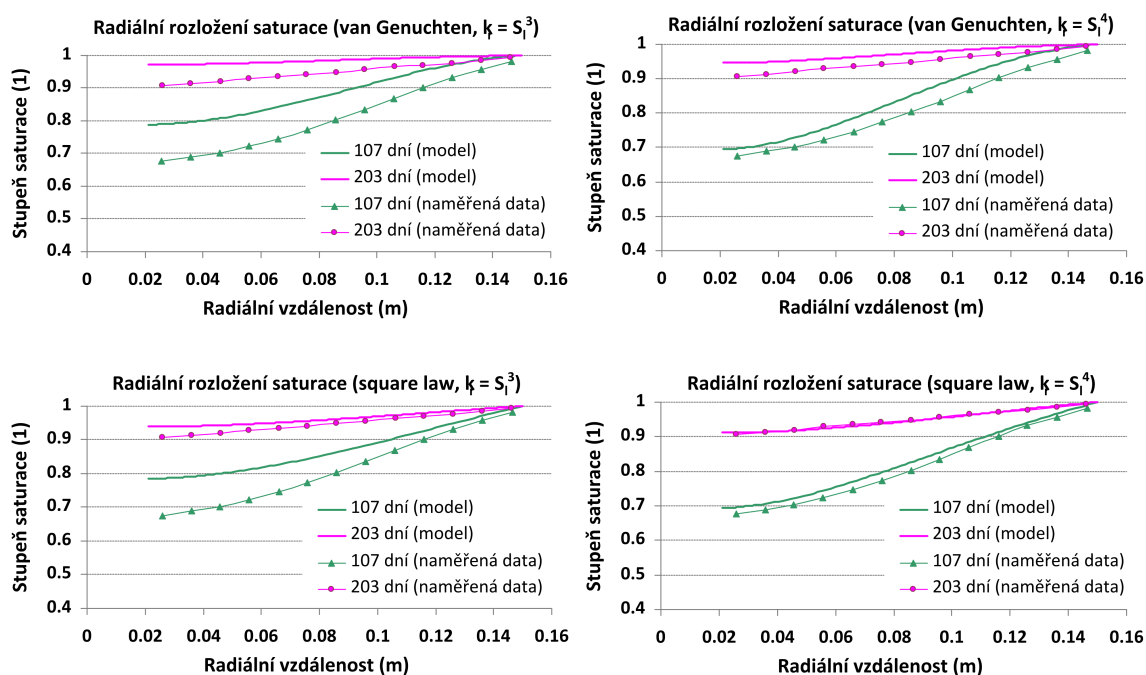
Konkrétně bylo provedeno porovnání průběhů stupně saturace, relativní vlhkosti a kumulativního objemu vody s relativně dobrou shodou, přičemž nejmenší rozdíly mezi naměřenými a simulovanými hodnotami byly zaznamenány pro materiál „SL, $k_r = S_l^4$ “. Výsledky modelů byly dále ověřeny na simulacích v dalších dvou softwarech: COMSOL Multiphysics a ISERIT také s dobrou shodou.



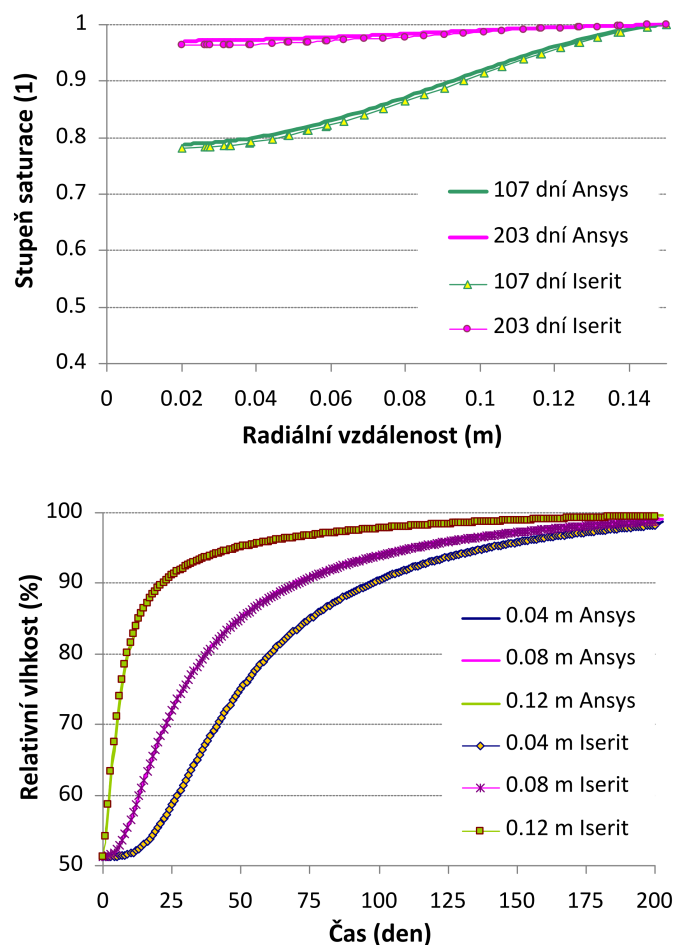
Obr. 6.4: Kumulativní objem vody v závislosti na čase pro čtyři případy modelů podle experimentu Water Uptake Test



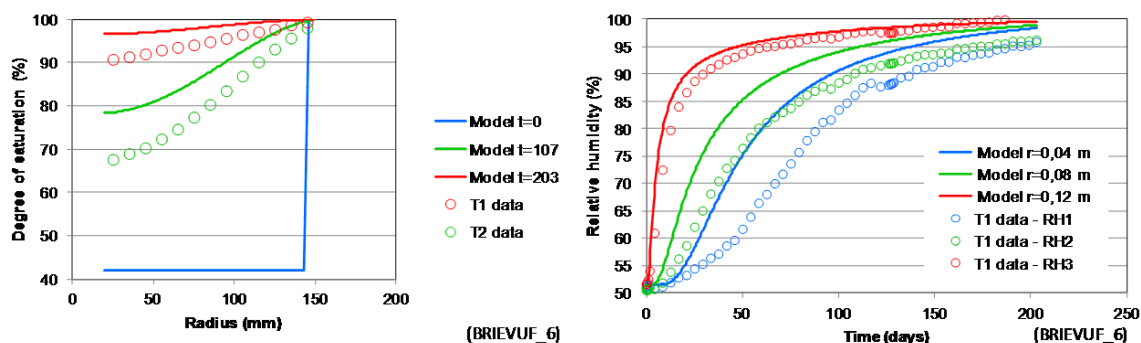
Obr. 6.5: Relativní vlhkost v závislosti na čase ve vzdálenostech 4, 8 a 12 cm od osy modelu pro čtyři případy modelů podle experimentu Water Uptake Test



Obr. 6.6: Radiální rozložení saturace v čase 107 a 203 dní pro čtyři případy modelů podle experimentu Water Uptake Test



Obr. 6.7: Porovnání radiálních průběhů saturace a průběhů relativní vlhkosti v čase pro výsledky modelů řešených v softwarech ANSYS a Iserit pro variantu „VG, $k_r = S_l^3$ “ v rámci experimentu Water Uptake Test



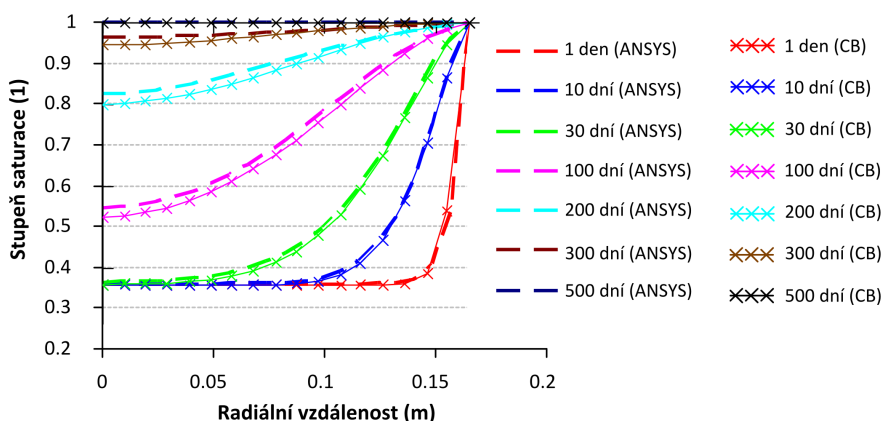
Obr. 6.8: Porovnání radiálních průběhů saturace a průběhů relativní vlhkosti v čase (měřená data vs. výsledky ze softwaru Code_Bright) pro variantu „VG, $k_r = S_l^3$ “ v rámci experimentu Water Uptake Test, převzato z [1]

6.3 1D osově symetrický testovací model

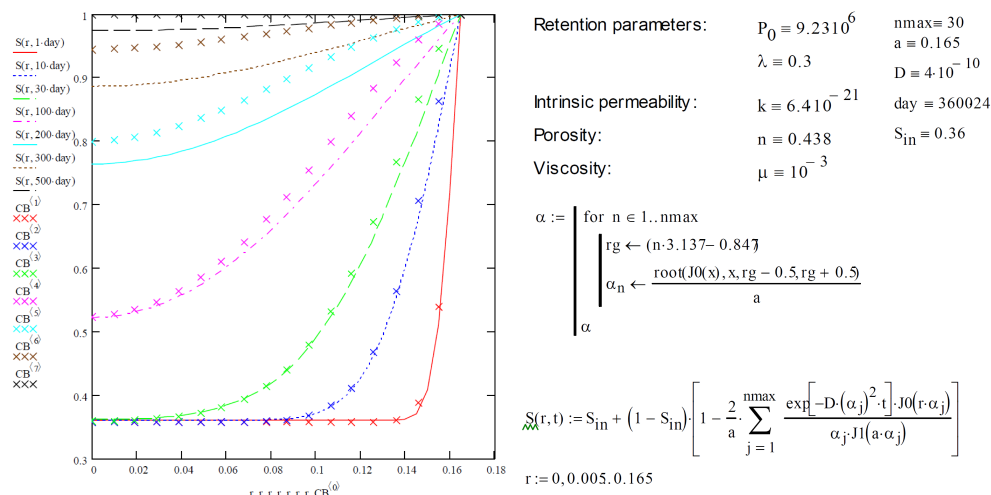
Modely popisující hydrataci byly otestovány na jednoduchých případech s osově symetrickými geometriemi. V první fázi byly postupně řešeny 1D a 2D osově symetrické modely, které slouží k ověření konzistence simulovaných procesů a předpokládaného skutečného chování, ale také k porovnání s referenčními výpočty [7].

Nejjednodušším případem je 1D osově symetrický model bentonitu s bodovým vtokem do modelu, který nezahrnuje žádné další vlivy. Tento model představuje vrt o poloměru 16,5 cm, s nekonečnou výškou, díky symetriím je reprezentován linií o délce rovné poloměru vrtu. Na počátku linie je předepsána okrajová podmínka osově symetrie, na levém okraji okrajová podmínka plné saturace ($S_l = 100\%$) reprezentující bodový vtok do modelu (neomezený zdroj vody). Model byl simulován jako neustálená úloha do času 500 dní. Difuzivita bentonitu byla určena podle vztahu (3.10) dosazením doporučených materiálových parametrů z Tab. 3.2, kde $k_{dopor.} = 6,4 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2$.

Touto simulací jsme proces otestovali a výsledky srovnali s referenčním výpočtem z [7] simulovaným v nástroji Code_Bright. Porovnání je uvedeno v grafu na Obr. 6.9, kde časové průběhy stupně saturace v závislosti na radiální vzdálenosti vykazují poměrně dobrou shodu s referenčními výsledky. Pro představu je na Obr. 6.10 uvedeno i porovnání referenčních Code_Bright výsledků s analytickým řešením. Průběhy si kvalitativně odpovídají, ale přibližně od času 200 dní se projevují odlišnosti, které jsou dány hodnotou difuzivity, nezávislou na stupni saturace, použitou v analytickém řešení. Z Obr. 6.9 a Obr. 6.10 je však patrný menší rozdíl mezi daty simulovanými softwaru ANSYS a Code_Bright, než u průběhu z analytického řešení porovnaného s Code_Bright výsledky.



Obr. 6.9: Porovnání radiálních průběhů saturace pro 1D osově symetrický model vypočtený difuzní rovnicí s nelineární difuzivitou (ANSYS) s výsledky modelu implementovaného v softwaru Code_Bright (CB), výsledek Code_Bright převzat z [7]



Obr. 6.10: Porovnání radiálních průběhů saturace pro 1D osově symetrický model: analytické řešení s výsledky modelu implementovaného v softwaru Code_Bright, převzato z [7]

6.4 2D osově symetrické modely

Na výše uvedené simulace navazují 2D osově symetrické modely, které byly řešeny ve dvou variantách:

- simulace, které rozšiřují výše uvedený 1D model do 2D s liniovým přítokem vody (kapitola 6.4.1),
- modely, které simulují proces hydratace ovlivněný jak přítokem puklinou, tak saturací přes rozhraní hornina-bentonit (kapitola 6.4.2)

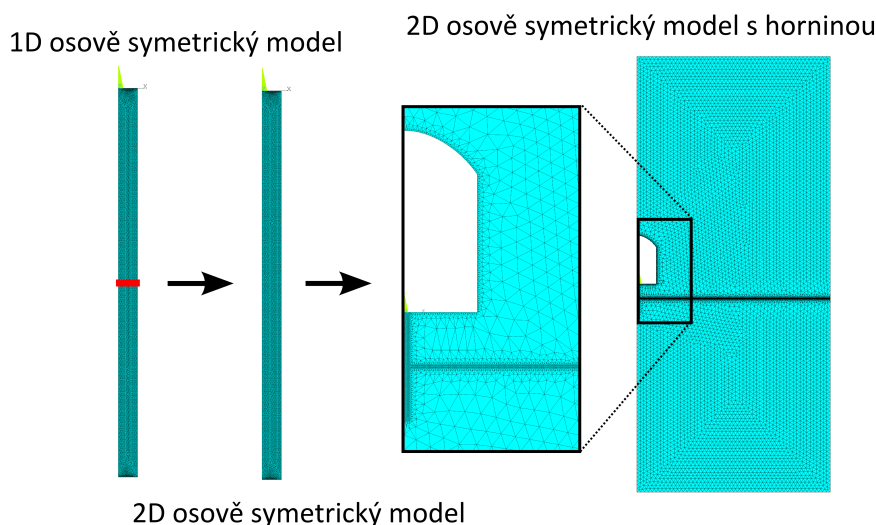
Ve druhém případě puklina spolu s horninou představují dvě cesty, kterými se může voda do bentonitu transportovat. K nasycení dochází nerovnoměrně a je dáno jak propustností jednotlivých médií, tak schopností bentonitu vodu přijímat. Uvedené modely jsou nejjednodušším případem v rámci této práce, jenž se snaží vystihnout rozdíly v procesu hydratace ovlivněném pouze puklinou nebo puklinou a horninovou maticí. Návaznosti a vztah jednotlivých řešení 1D a 2D modelů popisuje Obr. 6.11.

6.4.1 Popis 2D osově symetrického modelu bez horniny

Geometrie 2D osově symetrického modelu vrtu je tvořena obdélníkem o šířce 16,5 cm a výšce 3 m. Díky osově symetrii tato konfigurace reprezentuje válec, který přibližně odpovídá rozměrům skutečných vrtů experimentu BRIE (vrty se liší svou hloubkou v řádu jednotek až desítek cm a poloměrem v řádu jednotek cm). Materiálové

parametry jsou shodné jako ve výše uvedeném případě (doporučené materiálové parametry, Tab. 3.2), difuzivita je uvažována podle vztahu (3.10).

Na vnějším okraji 2D osově symetrického modelu bez horniny je předepsán nulový tok. Výjimku tvoří 10 cm dlouhá linie představující průnik povrchu vrtu s puklinou v polovině jeho výšky, na které je předepsána plná saturace $S_l = 100 \%$. Délka linie je volena tak, aby odpovídala šířce pukliny uvažované ve 2D osově symetrickém modelu s horninou a bylo možné výsledky obou modelů porovnat. Tato okrajová podmínka reprezentuje neomezený zdroj vody, jedinou cestu, kterou se může v tomto modelu bentonit hydratovat. Počáteční nasycení bentonitu je nastaveno na 36 %.



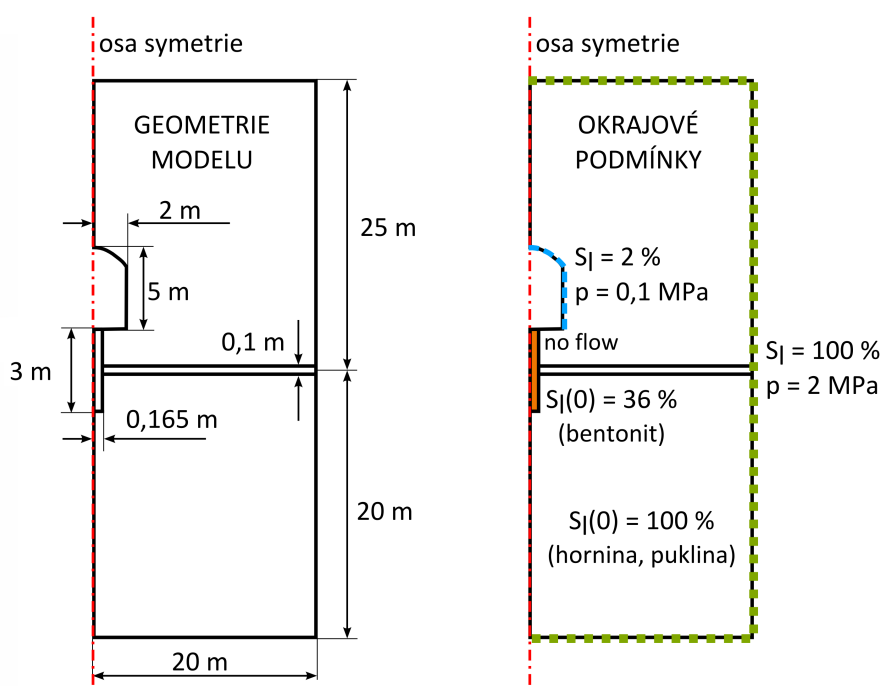
Obr. 6.11: Výpočetní sítě 1D a 2D osově symetrických modelů pro výpočet hydratace bentonitu

6.4.2 Popis 2D osově symetrického modelu s horninou

Model s vlivem hydratace horninou je vypočten na 2D osově symetrické geometrii uvedené vlevo na Obr. 6.12. Velikost modelu je 20×25 m, poloměr a hloubka vrtu zůstaly pro účely porovnání shodné s 1D osově symetrickým modelem a referenčními daty. Osa symetrie prochází vertikálně osou vrtu, model obsahuje horizontální puklinu s rozevřením 10 cm, která vede od vnějšího okraje modelu až k vrtu s bentonitem. Místo ukládacího tunelu je do modelu zahrnuta pouze dutina, viz Obr. 6.12. Výpočetní síť modelu je uvedena vpravo na Obr. 6.11 spolu s detailem okolí vrtu.

Simulace byly nejdříve počítány s doporučeným materiálovým modelem, ale při porovnání s referenčním výpočtem si výsledky příliš neodpovídaly. Proto byly parametry modifikovány kalibrací na referenční výpočet (více v kapitole 6.4.3). Doporučené i modifikované materiálové parametry jsou uvedeny v Tab. 3.2.

Počáteční hodnota stupně saturace bentonitu je v tomto modelu také uvažována na úrovni 36 %, hornina a puklina jsou na počátku procesu plně nasycené. Na vnějším okraji modelu je předepsána okrajová podmínka plné saturace ($S_l = 100 \%$) – neomezený zdroj vody. Na dolní straně dutiny („tunelu“) je předepsán nulový tok představující nepropustnou hranici. Na stěnách dutiny je aplikována okrajová podmínka s nízkým stupněm saturace ($S_l = 2 \%$), která lépe odpovídá realitě než plná saturace přepočtená z hodnoty tlaku 0,1 MPa z referenčních materiálů. Okrajové podmínky jsou zobrazeny na Obr. 6.12, kde jsou popsány i odpovídající hodnoty tlaku získané z inverze retenční křivky. Počty uzlů a elementů jednotlivých modelů spolu s minimální a maximální velikostí elementů (velikost definovaná při tvorbě výpočetní sítě) jsou uvedeny v Tab. 6.2. Modely byly simulovány do času 800 dnů, kdy došlo k nasycení bentonitu.



Obr. 6.12: Geometrie a aplikované okrajové podmínky pro 2D osově symetrický model s okolní horninou

Tab. 6.2: Počty uzlů a elementů a minimální a maximální velikost elementu v osově symetrických modelech, velikosti jsou uvedeny podle zadání při definici výpočetní sítě

Model	Počet uzlů	Počet el.	Min.vel.el.(m)	Max.vel.el.(m)
1D bentonit	137	136	0,0012	0,0012
2D bentonit	5611	10560	0,01	0,01
2D s horninou	59565	117385	0,01	0,2

6.4.3 Výsledky modelů

Modely vyhodnocujeme na základě rychlosti a průběhu hydratace bentonitu. Sledujeme rozložení obsažené vody v bentonitu v čase a také vliv nasycení rozhraním hornina-bentonit a přítomnou puklinou. Výstupem jsou buď konturové mapy znázorňující stupeň nasycení v konkrétním časovém kroku nebo grafy závislosti stupně saturace na vzdálenosti v daném časovém kroku (osový nebo radiální průběh). Další možností vyhodnocení je porovnání časů dosažení vybraných stupňů saturace (tzn. časových kroků, ve kterých je v celém modelu dosaženo minimálně uvedeného stupně saturace).

2D osově symetrický model bez dalších vlivů

2D osově symetrický model bez dalších vlivů slouží jako první srovnávací případ – na jeho výsledcích v porovnání s výsledky 2D osově symetrického modelu s horninou jsme ověřili, že vliv horniny na proces saturace bentonitu ve vrtu je poměrně výrazný.

V modelu je uvažován „liniový“ přítok malého rozsahu bez vlivu okolní horniny, průběh hydratace je tedy velice pomalý a ani po 50 letech nedojde k plnému nasycení a spodní a vrchní část vrtu si zachovávají počáteční saturaci (na rozdíl od modelu s vlivem horniny, kde k plné hydrataci dojde v řádu několika let). V referenčních výpočtech byl na rozdíl od našeho modelu uvažován vliv horniny i pukliny na hydrataci, nelze tedy dosažené výsledky mezi sebou řádně porovnat.

2D osově symetrický model s horninou

Rozšířený model s horninou a tunelem s doporučenými materiálovými parametry se oproti referenčním datům saturuje rychleji. Vysoká hodnota difuzivity horniny zcela potlačuje vliv pukliny. Na Obr. 6.13, kde jsou zobrazeny radiální a osově průběhy stupně saturace v závislosti na čase spolu s referenčními daty, se neprojeví lokální maximum v místě pukliny, které je patrné u referenčních dat.

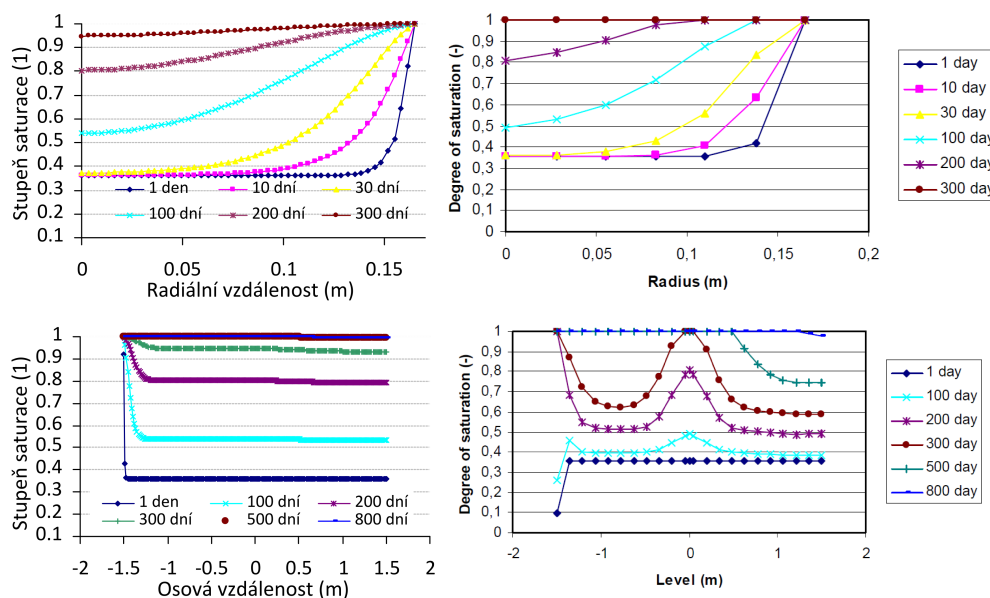
Doporučené parametry nebyly zadány striktně, spíše pro základní představu a navíc nelze s určitostí tvrdit, že ve shodné podobě byly použity i ve srovnávacích výpočtech v softwaru Code_Bright. Proto jsme je modifikovali kalibrací na referenční výpočet uvedený v [7]. Změněny byly pouze propustnosti jednotlivých materiálů (Tab. 3.2) a s těmito parametry byly znovu spočítány jednotlivé difuzivity. Difuzivita bentonitu se změnila pouze nepatrně, výrazněji byla modifikována propustnost horniny (snížení o necelé dva řády), což můžeme zdůvodnit proměnlivými vlastnostmi horninového prostředí. Závislosti doporučených a modifikovaných difuzivit na stupni saturace jsou pro porovnání uvedeny na Obr. 3.4.

Dále se ukázalo, že od hodnoty $2,5 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ nemá zvýšení propustnosti pukliny žádný vliv na hydrataci bentonitu (bentonit není schopen více vody pojmout), což bylo otestováno na tomto modelu s několika různými propustnostmi pukliny.

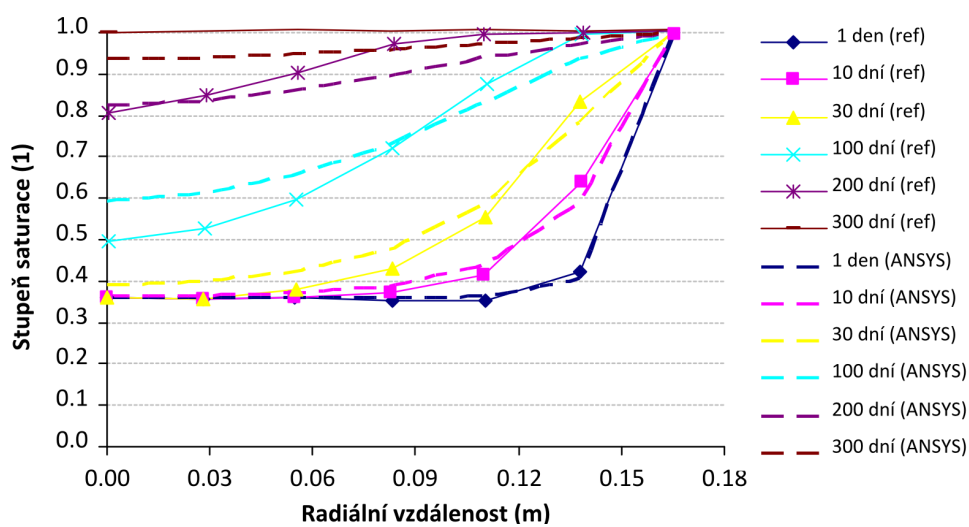
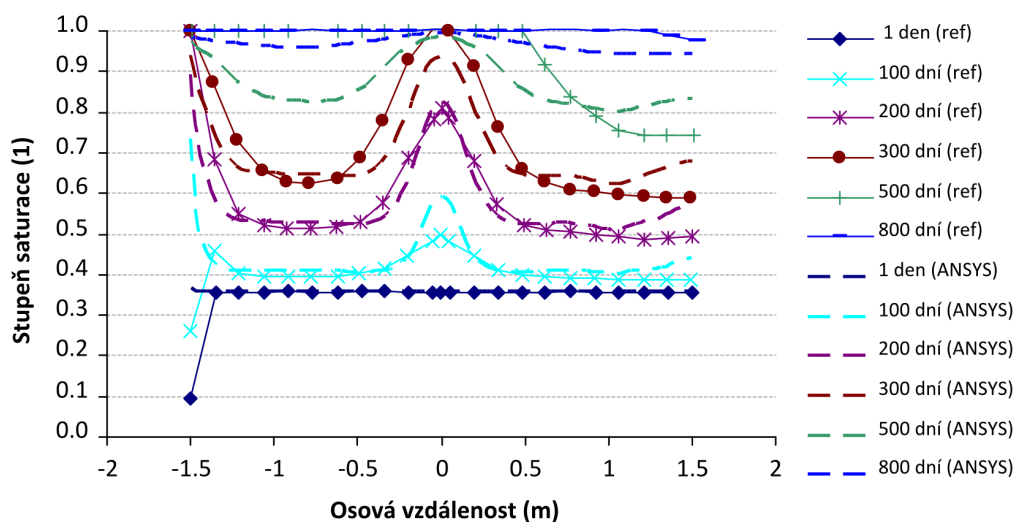
Porovnání kalibrovaných materiálových parametrů s referenčními daty je zobrazeno na Obr. 6.14 pomocí radiálních a osových průběhů stupně saturace v různých časových krocích. Protože jsme měli k dispozici pouze grafická data k porovnání,

hodnoty jednotlivých průběhů nemusí být příliš přesné. Průběhy simulované pomocí difuzní rovnice v softwaru ANSYS vykazují kvalitativní shodu s referenčními daty, kvantitativně však korespondují pouze omezeně. Vliv pukliny, zobrazený v osových profilech jako lokální maximum ve vzdálenosti „0“, je v modelech ze softwaru ANSYS nejprve trochu nadhodnocen, od časového kroku 300 dní je naopak nižší (s rozdíly do 10 %). V grafu radiálních průběhů probíhá v difuzním modelu saturace obdobně, od času 100 dní je však zřetelný méně strmý pokles simulovaných křivek v závislosti na vzdálenosti od pukliny. V časovém kroku 300 dní je model ze softwaru ANSYS podle radiálního profilu saturace celkově hydratován méně, než ukazují referenční data. Rozdíl v osových průbězích na vertikální souřadnici $z = -1,5$ m je dán rychlostí hydratace, v modelech v softwaru ANSYS dochází k rychlejší saturaci prostřednictvím horniny, vykazují tedy i v dřívějších časových krocích vyšší stupeň saturace.

Graficky znázorněné průběhy hydratace pro doporučený i modifikovaný materiál v obou variantách 2D osově symetrických modelů jsou zobrazeny v Příloze B.



Obr. 6.13: Porovnání výsledků pro 2D osově symetrický model s horninou s doporučenými parametry (vlevo) s referenčními daty převzatými z [7] (vpravo)



Obr. 6.14: Porovnání výsledků pro 2D osově symetrický model s horninou s modifikovanými parametry s referenčními daty převzatými z [7]

6.4.4 Vyhodnocení

Osově symetrické modely byly definovány jako testovací případy sloužící pro porovnání s referenčními výpočty provedenými softwarem Code_Bright uvedenými v [7], pro kalibraci parametrů materiálových modelů, ale také pro ověření významnosti vlivu horninové matrice oproti přítomné puklině.

Modelové výsledky byly pro vybrané případy s poměrně dobrou shodou srovnány jednak s analytickým řešením, jednak s referenčními výpočty. Zároveň byly kalibrací na referenční výpočet určeny modifikované parametry pro bentonit a horninu, které využíváme v dalších simulacích. Z testovacích modelů byl také odhadnut limit pro propustnost pukliny, při němž bentonit v modelu již nedokáže přijímat více vody. Z modelů také vyplynul poměrně významný vliv horninové matrice na hydrataci bentonitu, a je tedy zřejmé, že horninu v modelech nelze zanedbat.

6.5 3D modely hydratace bentonitu

Kapitola se zabývá popisem a hodnocením chování bentonitové bariéry s nehomogenním přítokem vody z horniny způsobujícím nerovnoměrnou hydrataci v měřítku ukládacích vrtů. Bentonit je uložen ve vrtech, jejichž geometrie odpovídá konfiguraci reálného experimentu BRIE v podzemní laboratoři v Äspö ve Švédsku, který je popsán v kapitole 6.1).

Experiment BRIE poskytuje naměřená data, která můžeme porovnat s výstupy numerických simulací, a tak se snažit přispět k přesnějšímu popisu a porozumění procesům na rozhraní bentonit-hornina. Díky netriviálním polohám puklin jsou simulace provedeny na 3D geometriích, přičemž rozšiřují osově symetrické modely uvedené v předchozích kapitolách. Na popsané modely syčení uvedené v této kapitole dále navazuje problém popisující sdružené hydro-mechanické (HM) chování v kapitole 6.6. Doposud prezentované modely byly založeny na uměle definovaných podmínkách, v simulacích uvedených v této kapitole a v kapitole 6.6 se pomocí modelů snažíme vystihnout maximum z konkrétních podmínek experimentu BRIE.

V modelech je nejprve uvažována pouze saturace přítomnými puklinami – líniovými přítoky, jejichž polohy byly získány z geologického mapování, přičemž je zcela zanedbán přítok vody okolní horninou. V dalším kroku je do modelů přidán i vliv saturace prostřednictvím horninové matrice pomocí zjednodušené myšlenky více-škálových modelů, kde je přenesen vliv horniny z modelu ve větším měřítku do okrajové podmínky modelu v měřítku menším.

Takto zjednodušené modely nevystihují proces hydratace v plné šíři a podrobnosti, ale snaží se nalézt jednoduchou alternativu ke 3D modelům s okolní horninovou maticí. Mají i určitá omezení v popisu saturace, která budou na konkrétních případech vysvětlena níže, naproti tomu ale umožňují do modelu zahrnout i netriviální konfigurace puklin v okolní hornině a ovlivňující tok vody v okolí vrtu.

6.5.1 Hydratace bentonitu puklinami bez vlivu horniny

V této části modelujeme proces hydratace bentonitu na 3D modelech vrtů KO0017G01 a KO0018G01 experimentu BRIE, přičemž uvažujeme pouze syčení prostřednictvím puklin procházejících okolní horninou (vliv horninové matrice není v této části zahrnut). Je zaveden předpoklad, že pukliny neustále dodávají vodu do vrtu, což reprezentuje předepsaná okrajová podmínka.

Díky obecně definovaným polohám puklin nelze dále použít zjednodušení pomocí osově symetrie prezentované pro modely uvedené v kapitole 6.4. Hydrataci řešíme ve dvou odlišných variantách podle počtu uvažovaných puklin (jejich polohy jsou definované podle zadávací dokumentace experimentu BRIE):

- modely s několika puklinami (pět puklin pro vrt KO0017G01, šest pro vrt KO0018G01),
- modely s jednou dominantní puklinou z hlediska dotace vody uvažované v každém z vrtů.

V první variantě uvažujeme téměř všechny neutěsněné pukliny podle dokumentace bez ohledu na velikost jejich rozevření a propustnost. V druhé variantě zahrnujeme do modelu pro každý vrt pouze jedinou, nejvíce propustnou puklinu, která by měla mít dominantní vliv na přítok vody do vrtu. Poloha této pukliny se ani v jedné variantě plně neshoduje s polohami puklin nadefinovaných v prvním případě, protože podle aktualizované zprávy [7] byly polohy puklin v předchozí verzi dokumentace nepřesně identifikovány. Opravené polohy pro první variantu však už nebyly dodány a v dalších výpočtech v rámci TF EBS bylo doporučeno vycházet z pozic jedné nejvíce vodivé pukliny. V rámci této práce jsme se však rozhodli nepřesné polohy puklin využít jako modelový případ pro účely porovnání vlivu počtu puklin a jejich rozmístění na hydrataci vrtů.

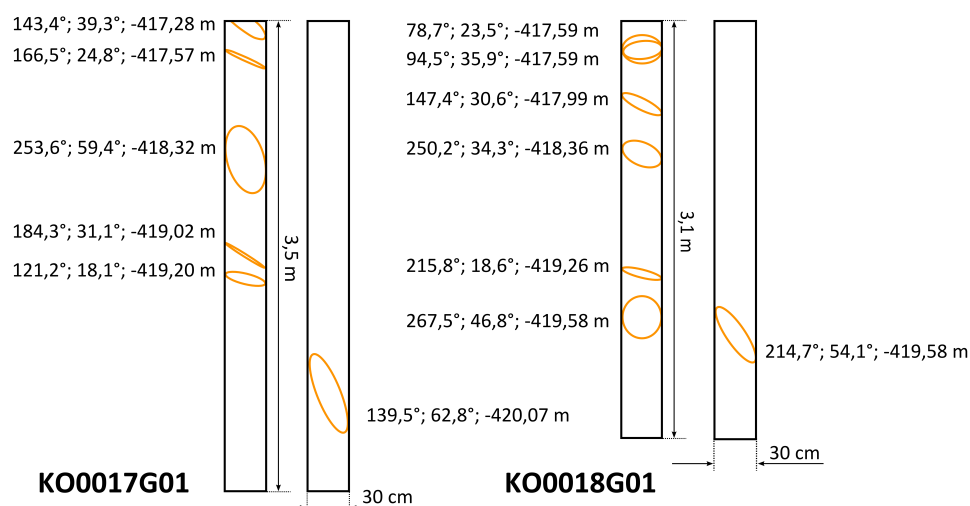
Popis modelu

Modely jsou řešeny na geometriích uvedených na Obr. 6.15, kde jsou znázorněny i polohy puklin v jednotlivých vrtech. Vrtů se liší svojí hloubkou, vrt KO0017G01 je celkově hluboký 3,5 m, vrt KO0018G01 3,1 m, poloměr obou vrtů je 15 cm. Pukliny procházející okolní horninou bylo třeba zahrnout již do geometrie. V tomto případě jsou vyjádřeny jako uzavřené křivky protínající vnější povrch vrtů – tyto linie budou respektovány i při konstrukci konečně-prvkové sítě a dále budou využity při zadávání okrajových podmínek. Polohy puklin byly převzaty z dokumentace k experimentu BRIE a jsou popsány třemi parametry: orientace pukliny pomocí dvou úhlů „strike“ (směr sklonu) a „dip“ (sklon) a vertikální souřadnice roviny pukliny v ose vrtu. Ze zdokumentovaných puklin byly vybrány pouze ty, které mohou mít potenciální vliv na hydrataci – propustné pukliny. V několika případech nebylo možné do modelu zahrnout pukliny s blízkou polohou, protože díky nim nebylo možné spolehlivě vytvořit výpočetní síť. V každém z těchto případů je v problematických místech definována pouze jedna reprezentativní puklina. Použité pukliny byly převzaty z tabulky v příloze C, kde je uveden geometrický popis a další charakteristiky všech zmapovaných puklin.

Výpočetní síť 3D modelů jsou tvořeny 50 až 70 tisíci elementy a asi 10 tisíci uzly podle uvažovaného vrtu, konkrétní hodnoty uvádí Tab. 6.3.

Podobně jako pro 2D osově symetrické modely v předchozí části je hydratace bentonitu řešena pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou závislou na stupni saturace, která je popsána v kapitole 3.1. Využili jsme modifikované materiálové parametry podle Tab. 3.2 získané kalibrací na referenční data, jenž je uvedena v předchozí kapitole.

V obou variantách modelů je uvažována počáteční saturace bentonitu $S_l = 36 \%$. Přísun vody do vrtu je simulován prostřednictvím puklin – na jejich průsečnicích s povrchem vrtů je předepsána plná saturace ($S_l = 100 \%$). Tyto křivky reprezentují jedinou cestu, kterou může docházet k hydrataci bentonitu (u puklin je předpokládána shodná transmisivita). Množství vody, které je do vrtu transportováno, je ovlivněno pouze délkou průsečnice pukliny s povrchem vrtů. V popsáných variantách neuvažujeme hydrataci horninou, což odpovídá předepsanému nulovému toku na obou podstavách a vnějším plášti válce představujícím vrt.



Obr. 6.15: Geometrie vrtů KO0017G01 a KO0018G01 s vyznačenými polohami puklin a jejich geometrickou charakteristikou (úhly „strike“, „dip“ a vertikální souřadnice), dvě varianty geometrie

Tab. 6.3: Počty uzlů a elementů ve výpočetních sítích 3D hydraulických modelů vrtů KO0017G01 a KO0018G01 experimentu BRIE

Varianta modelu	Počet uzlů	Počet elementů
KO0017G01 (5 puklin)	10 814	54 529
KO0017G01 (1 puklina)	13 437	69 138
KO0018G01 (6 puklin)	10 290	52 199
KO0018G01 (1 puklina)	11 807	60 548

Výsledky

U popsáných modelů hodnotíme rychlost a průběh nerovnoměrné hydratace bentonitu v závislosti na počtu a poloze puklin. Obecně platí, že vyšší saturace je dosaženo v místech, kde se nachází více puklin blízko sebe. Naopak pro části vrtů s úplnou absencí puklin (obzvláště u vrtu KO0017G01 s více puklinami a u obou vrtů ve variantě s jednou puklinou) je saturace velice pozvolná, protože veškerá voda přichází pouze ze vzdálených puklin. Dále pak platí, že čím větším úhlem sklonu je puklina charakterizována, tím delší je průsečnice pukliny s povrchem vrtu a tím větší vliv má puklina na hydrataci bentonitu.

Vliv rozložení puklin je dobře vidět na časech dosažení konkrétních stupňů saturace ($S_l = 50, 75, 92$ a 95%), které uvádí Tab. 6.4 pro všechny řešené modely. Časem dosažení určitého stupně saturace označujeme ten časový krok, ve kterém je v celém objemu modelu dosaženo alespoň daného stupně nasycení. Modely s jednou puklinou se podle očekávání hydratují výrazně pomaleji než modely s více puklinami (112,8 let vs. 301,2 let pro 95% saturaci u vrtu KO0017G01 a 33,0 let vs. 222,2 let

pro 95% saturaci pro vrt KO0018G01). Poměrně velké rozdíly jsou patrné i mezi oběma vrty ve variantách s jednou nebo více puklinami.

Průběh saturace pro vrt KO0017G01 s více puklinami je výrazně pomalejší než pro vrt KO0018G01. Důvodem je nerovnoměrnost rozložení puklin po délce vrtu: KO0017G01 neobsahuje žádné pukliny v dolním 1,5 m délky. Pokud v modelech obou vrtů uvažujeme pouze jednu puklinu, tak se oba vrty hydratují poměrně odlišně, což je opět dáno polohou a natočením roviny pukliny (dokazuje to např. rozdíl dosažení 95% nasycení mezi vrty, který je téměř 80 let).

Průběhy saturace můžeme také srovnat pomocí osových závislostí v různých časových krocích. Osové průběhy nasycení jsou pro variantu s jednou i více puklinami pro oba vrty uvedeny v příloze D. Na průbězích jsou patrná lokální maxima v místech, kde se nachází pukliny, přičemž dvě blízké pukliny mohou způsobovat výskyt pouze jednoho maxima. Šířka maxima v grafu je ovlivněna úhlem sklonu pukliny – širší maximum indikuje puklinu s větším sklonem. Modely s více puklinami se hydratují zejména směrem od horních částí vrtů, dolní části pukliny neobsahují (výraznější je tento jev pro KO0017G01, kde se dolní část významněji saturuje až po několika desítkách let). Z grafů pro modely s jednou puklinou je patrné pouze jediné maximum, které je nepatrně širší pro model vrtu KO0017G01 (delší průsečnice pukliny na povrchu vrtu). Protože se však puklina u tohoto vrtu vyskytuje ve větší hloubce a vrt má o 13 % větší objem než vrt KO0018G01, probíhá saturace pomaleji – podle Tab. 6.4 asi o čtvrtinu pomaleji.

Pokud srovnáme proces hydratace ve 3D modelech popsanych v této části s 2D osově symetrickým modelem bez vlivu horniny s bodovým přítokem, časy dosažení jednotlivých stupňů saturace se přibližují pouze u vrtu KO0017G01 s pěti puklinami. Vrt KO0018G01 se šesti puklinami se hydratuje přibližně třikrát rychleji než vrt v osově symetrickém modelu, varianty s jednou puklinou naopak dvakrát až třikrát pomaleji, viz Tab. 6.4.

Tab. 6.4: Rychlost saturace pro 3D modely vrtů v porovnání s 2D osově symetrickým modelem bez vlivu saturace prostřednictvím horniny (model obsahující pouze bentonit), čas dosažení daného stupně saturace vyjadřuje čas, kdy je dosažena minimálně uvedená hodnota saturace v celém objemu modelu, „3D 17“ označuje 3D model vrtu KO0017G01 a „3D 18“ 3D model vrtu KO0018G01

Model	$S_l = 50 \%$ Čas(rok)	$S_l = 75 \%$ Čas(rok)	$S_l = 92 \%$ Čas(rok)	$S_l = 95 \%$ Čas(rok)
2D (bez horniny)	22,5	50,0	85,0	97,5
3D 17 (5 puklin)	25,8	58,8	100,8	112,8
3D 18 (6 puklin)	7,5	16,9	29,2	33,0
3D 17 (1 puklina)	66,3	156,7	265,1	301,2
3D 18 (1 puklina)	50,1	115,7	194,4	222,2

6.5.2 Hydratace bentonitu puklinami a horninovou maticí

Modely v této kapitole rozšiřují výše představené simulace o vliv syčení prostřednictvím horninové matrice. Jejich geometrie horninu fyzicky neobsahuje, ale přesto je v ní zahrnut její vliv pomocí okrajové podmínky. Účinek puklin zůstává definován shodným způsobem jako u modelů bez vlivu horniny. Jako v předchozí části modely řešíme ve variantách s jednou a s více puklinami pro oba uvažované vrty. Navíc pro porovnání definujeme dvě verze okrajové podmínky reprezentující tok méně a více propustnou horninou.

Popis modelů

Při definici modelů jsme vycházeli ze simulací popsaných v části 6.5.1, použitá geometrie je uvedena na Obr. 6.15, materiálové parametry v Tab. 3.2 a počáteční podmínka pro bentonit je $S_l = 36 \%$, což plně odpovídá předchozím modelům. Změněny byly pouze okrajové podmínky – k neomezenému zdroji vody předepsanému na křivkách představujících průsečnice puklin s povrchem vrtu (Dirichletova okrajová podmínka, $S_l = 100 \%$) jsme přidali Newtonovu okrajovou podmínku, která reprezentuje hydrataci prostřednictvím horniny. Představuje závislost předepsaného toku na velikosti stupně saturace bentonitu a je nastavena na plášti vrtů a na dolní podstavě (neuvažuje pouze vrchní podstavu, kde vrt ústí do tunelu a s horninou není v kontaktu).

Okrajová podmínka reprezentující tok horninou

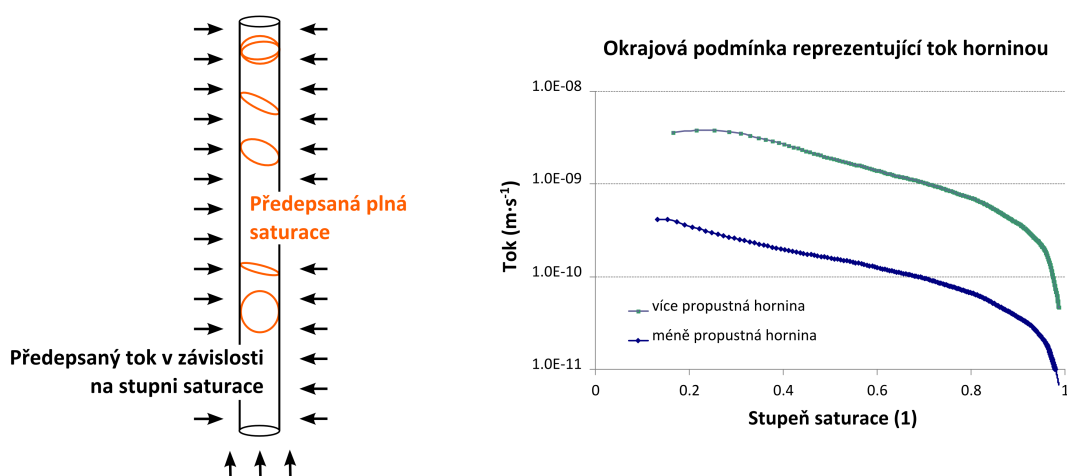
Tato okrajová podmínka je uvedena na Obr. 6.16 závisí na stupni saturace a byla odvozena z 2D osově symetrického modelu ve větším měřítku, který byl definován podle modelů v kapitole 6.4.2. Kvůli negativnímu ovlivnění výsledků jsme z geometrie odebrali puklinu a ponechali pouze vrt vyplněný bentonitem s okolní horninou a „tunelem“. Z takto definovaného modelu jsme získali závislost toku vody z horniny do bentonitu na stupni saturace, což odpovídá toku, kterým hornina přispívá k hydrataci bentonitu.

Konkrétně jsme z výsledků 2D osově symetrického modelu získali časové průběhy saturace v pěti uzlech na rozhraní bentonit-hornina s ekvidistantně rozloženými z -souřadnicemi. Ve stejných časových krocích jsme v daných uzlech uložili i zprůměrovaný tok a tyto dvě závislosti pak sloučili do jedné – tok závisející na stupni saturace. Rozdíly průběhů byly v jednotlivých časových krocích pro uvažované uzly minimální (pro stupeň saturace maximálně v řádu 10^{-3} , pro difuzní tok maximálně v řádu 10^{-11}). Proto považujeme vybraný uzel (s vertikální souřadnicí $z = -1.8$ m) za dostatečně reprezentativní.

Výsledná okrajová podmínka je uvedena na Obr. 6.16 pro dvě použité propustnosti horniny, varianty jsou označeny jako:

- **Hornina 1:** okrajová podmínka byla odvozena z modelu s horninou o propustnosti $k = 9,0 \cdot 10^{-22} \text{ m}^2$ (ostatní materiálové parametry, viz Tab. 3.2)

- **Hornina 2:** analogický případ k variantě „Hornina 1“ s nižší propustností horniny ($k = 9,0 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2$).



Obr. 6.16: Schematické znázornění okrajových podmínek pro 3D modely s vlivem horniny (vlevo) a průběh okrajové podmínky reprezentující tok vody do bentonitu v závislosti na stupni saturace pro obě uvažované propustnosti horniny (vpravo)

Výsledky

Stejně jako u modelů bez vlivu horniny sledujeme průběh a rychlost procesu hydratace. Z výsledků simulací je zřejmé, že je vliv horniny na rychlost saturace v popsaných modelech poměrně výrazný. Proces syčení se poměrně zrychlil (většinou z řádu desítek až stovek let na stovky dní až jednotky roků).

Tab. 6.5 shrnuje časy dosažení 50%, 75%, 92% a 95% saturace pro modely 3D vrťů s vlivem horniny pro všechny řešené varianty (s jednou nebo více puklinami, pro obě uvažované okrajové podmínky simulující vliv horniny na hydrataci). Čas dosažení saturace označuje výpočetní krok, kdy je ve všech částech modelu dosaženo alespoň daného stupně saturace. Pro porovnání jsou uvedeny i hodnoty pro analogické 2D osově symetrické modely s horninou.

Rozdíly mezi modely s oběma uvažovanými okrajovými podmínkami simulujícími vliv horniny naopak tolik výrazný není – 95% saturace je pro případ modelů s okrajovou podmínkou „Hornina 1“ dosaženo maximálně za 173 dní, pro modely označené „Hornina 2“ 3,5 roku, viz Tab. 6.5. Syčení 2D osově symetrických modelů je ve srovnání s 3D variantami pomalejší, i když obsahuje poměrně širokou puklinu.

Rozdíly mezi variantami s jednou nebo více puklinami jsou méně významné, celkově se saturují obdobně rychle, liší se pouze lokálně na pozicích puklin. Tyto rozdíly jsou nejlépe vidět na osových průbězích stupně saturace v různých časech v příloze D. S daným výpočetním krokem nebylo možné rozlišit časy dosažení jednotlivých stupňů saturace pro modely s jednou puklinou (pukliny mají ve vrtech obdobnou polohu), které byly pro modely bez vlivu horniny poměrně dobře zřetelné, viz Tab. 6.4.

Výsledky pro modely vrtů KO0017G01 a KO0018G01 s pěti respektive šesti puklinami se také nijak výrazně neliší, vliv počtu a rozložení puklin se projevuje pouze minimálně.

V modelech díky okrajové podmínce předepsané na povrch vrtu narážíme na určité nefyzikální chování – v pozdějších časových krocích přesáhne stupeň saturace v některých místech velikost 100 %. Model tento stav umožňuje díky způsobu definice okrajové podmínky, kde je sice definován výrazný pokles toku v plně hydratovaných místech, ale syčení pokračuje dál, protože bentonit není nasycen v celém svém objemu. Stupeň saturace v takových místech roste nad 100 %. V ideálním případě by platilo, že při plné saturaci, je předepsaný tok nulový, z grafu na Obr. 6.16 je však patrné, že se tok k nule pouze asymptoticky blíží, tudíž dovolí, aby nasycení přesáhlo 100 %.

Tab. 6.5: Rychlost saturace pro 3D modely vrtů s puklinami v porovnání s 2D osově symetrickým modelem bentonitu (s vlivem horniny) pro oba případy modelů (více puklin, jedna puklina), čas dosažení daného stupně saturace vyjadřuje čas, kdy je dosažena minimálně uvedená hodnota saturace v celém objemu modelu, „3D 17“ označuje vrt KO0017G01 a „3D 18“ vrt KO0018G01

Varianta	Model	$S_l = 50 \%$	$S_l = 75 \%$	$S_l = 92 \%$	$S_l = 95 \%$
		Čas (den)	Čas (den)	Čas (den)	Čas (den)
Hornina 1	2D	104,0	272,0	552,0	656,0
	3D 17 (5 pukl.)	72,9	131,9	158,0	161,5
	3D 18 (6 pukl.)	78,1	135,4	159,7	163,2
	3D 17 (1 pukl.)	82,6	145,6	169,2	173,1
	3D 18 (1 pukl.)	82,6	145,6	169,2	173,1
		Čas (rok)	Čas (rok)	Čas (rok)	Čas (rok)
Hornina 2	2D	1,32	5,26	11,84	14,25
	3D 17 (5 pukl.)	0,66	2,09	3,03	3,20
	3D 18 (6 pukl.)	0,66	1,88	2,65	2,79
	3D 17 (1 pukl.)	0,95	2,40	3,35	3,50
	3D 18 (1 pukl.)	0,95	2,40	3,35	3,50

6.5.3 Vyhodnocení

Pro modely bez vlivu hydratace horninou jsme ukázali, jaký vliv má rozložení a počet puklin po délce vrtu. Z výsledků je zřejmé, že v závislosti na polohách puklin nelze zadání zjednodušit do osově symetrické úlohy, protože se vrty mnohdy saturují velice rozdílně. Pokud se v modelu nachází pouze jedna puklina, hydratace je velice pomalá (rozdíly oproti modelům s více puklinami činí i několik desítek let). Velkou roli v časech dosažení konkrétních stupňů nasycení hraje i rozložení puklin (rozdíly mohou činit také několik desítek let).

Dále byly řešeny modely s vlivem horniny popsaným pomocí okrajové podmínky, která byla přenesena z osově symetrických modelů se zahrnutou horninou ve větším měřítku. Pro srovnání byly uvažovány dvě různé propustnosti horniny. Tyto simulace naopak ukázaly, že se v globálním měřítku příliš neprojeví rozdílný počet a rozložení puklin. Hydratace se oproti modelům bez vlivu horniny výrazně zrychlila (většinou z řádu desítek až stovek let na stovky dní až jednotky roků) a rozložení stupně saturace ve vrtu se liší minimálně a hlavně okolo uvažovaných puklin. V tomto případě však musíme brát v úvahu, že byl pro popis hydratace vlivem horniny použito určité zjednodušení, které nedokáže plně vystihnout všechny aspekty procesu a v místech, kde byla dosažena plná saturace může docházet k nefyzikálnímu chování, které je však vysvětlitelné použitím okrajové podmínky.

6.6 3D sdružené HM modely

Sdružený HM model ve 3D popisuje proces bobtnání bentonitu při jeho hydrataci a částečně tím navazuje na modely sycení bentonitu v kapitole 6.5. V tomto případě se snažíme vystihnout bobtnání bentonitu v závislosti na netriviální poloze pukliny, v plné 3D geometrii, jenž vychází z reálných dat – jedná se o model vrtu označeného jako KO001701 experimentu BRIE obklopený blokem horniny s propustnou puklinou, která byla v okolí vrtu detekována. Poloha a orientace pukliny způsobuje nehomogenní přítok do vrtu a nerovnoměrnou hydrataci bentonitu a následně i jeho bobtnání. Z hlediska mechaniky v modelu vyhodnocujeme změny napětí (deformaci) v závislosti na změně objemu při bobtnání bentonitu.

6.6.1 Popis modelu

Použitá koncepce odpovídá koncepci popsané v kapitole 3.2. Uvažujeme difuzní rovnici s nelineární difuzivitou pro popis hydrauliky a nelineární elastický model pro popis mechanického chování. Sdružení obou procesů je realizováno pomocí Youngova modulu pružnosti a koeficientu objemové roztažnosti v závislosti na stupni saturace.

Hornina i puklina jsou charakterizovány lineárním mechanickým chováním (hornina je popsána jako tuhý materiál s nízkou objemovou roztažností. Puklina vlivem saturace také téměř nemění svůj objem, je ale naopak velice poddajná, viz kapitola 3.2.

Geometrie a použité materiálové parametry

Model představuje blok horniny o rozměrech $10 \times 10 \times 13,5$ m s vrtem ve tvaru válce s poloměrem podstavy 15 cm a výškou 3 m, který je vyplněný bentonitem, viz Obr. 6.17. Ve skutečnosti bude v plánovaném HÚ mezi kompaktovaným bentonitem a horninou mezera vyplněná bentonitovými peletami, v řešeném modelu však mezeru zanedbáváme, protože k prostředí přistupujeme jako ke kontinuu. Předpokládáme, že hornina bezprostředně navazuje na bentonit.

Celou geometrii protíná puklina, která je charakterizována následujícími parametry: strike = $139,5^\circ$, dip = $62,8^\circ$, vertikální souřadnice průniku pukliny s osou vrtu: $z = 2,73$ m. Tuto puklinu reprezentuje 3D kontinuum lišící se materiálovými vlastnostmi od horniny i bentonitu. Kvůli omezením simulačního nástroje a také obecným konečně-prvkovým požadavkům na velikost a tvar elementů, byla puklina realizována s větším rozevřením, než je u reálných puklin takového rozsahu v žule obvyklé. Byly otestovány dvě různé tloušťky pukliny (5 cm a 10 cm). Tyto hodnoty společně s materiálem pukliny reprezentují efektivní vlastnosti – transmisivitu pukliny korespondující s realistickým rozevřením pukliny v řádu mikrometrů a smykovou pevností pukliny vyjádřenou v GPa.

Difuzivita všech materiálů je určena podle vzorců uvedených v kapitole 3.1 (použity jsou různé vztahy pro bentonit a pro horninu s puklinou) a modifikovaných materiálových parametrů z Tab. 3.2. Mechanické materiálové vlastnosti jsou pro bentonit uvažovány podle Obr. 3.3 a Tab. 3.3 v závislosti na stupni nasycení. Horni-

nová matrice je popsána konstantními mechanickými parametry, objemová roztažnost je nastavena na hodnotu 10^{-10} (ANSYS nepřipustí ve výpočtu nulovou hodnotu). Materiál pukliny vychází z materiálového modelu pro horninu, liší se vyšší propustností a nižší normálovou tuhostí. Pro puklinu testujeme dva různé Youngovy moduly pružnosti:

- $E_1 = 6 \cdot 10^9$ Pa (materiál označujeme jako „Puklina 1“),
- $E_2 = 6 \cdot 10^5$ Pa (materiál označujeme jako „Puklina 2“),

kde první reprezentuje elastický režim a druhý s nižší hodnotou modulu pružnosti popisuje režim kluzu jako linearizaci elastické a plastické části v daném rozsahu. V kombinaci s dvěma různými tloušťkami pukliny tedy v simulacích řešíme čtyři různé situace.

Okrajové a počáteční podmínky a další nastavení

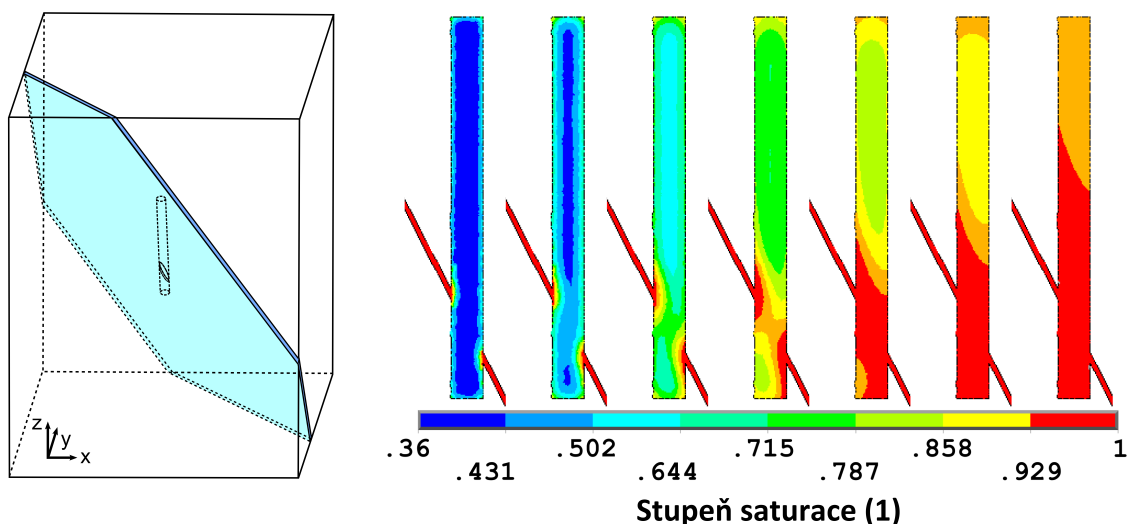
Na všech vnějších plochách výpočetní domény (okraje horninové matrice a pukliny) je předepsána okrajová podmínka plné saturace reprezentující neomezený zdroj vody. Stejně jako v případě 2D osově symetrických modelů předpokládáme, že hornina i puklina jsou na počátku procesu plně nasyceny ($S_l = 100$ %), bentonit ve vrtu je saturován pouze částečně ($S_l = 36$ %).

Na okrajích domény v příslušném normálovém směru je předepsáno nulové posunutí, které dovoluje pohyb ve dvou zbývajících směrech a je nastaveno tak, aby bylo možné vyhodnotit změnu napětí vycházející ze změny objemu bentonitu při bobtnání.

Problém byl řešen jako neustálená úloha do času 3,2 let na konečně-prvkové síti obsahující přibližně 72 tisíc uzlů a 50 tisíc elementů. V každém časovém kroku se řešila jak hydraulická, tak i mechanická část úlohy. Přestože takto definovaný model lze označit jako „malý problém“, jeho řešení bylo poměrně časově náročné – při výpočtu 20 časových kroků trvala simulace okolo 28 hodin (při testovacích simulacích na pouhých 5 časových kroků 8 hodin). Je však nutné podotknout, že výpočet byl proveden na starší počítači (Intel Core2 Duo CPU P8600 @2,40 GHz, 3,5 GB RAM), a proto nebylo možné použít jemnější výpočetní síť s vyšším počtem elementů.

6.6.2 Výsledky hydraulické části modelu

Bentonit ve vrtu se hydratuje dvěma způsoby: přítomnou puklinou a přes rozhraní hornina-bentonit. Jak je patrné z průběhu saturace znázorněného vpravo na Obr. 6.17, puklina významně ovlivňuje nerovnoměrný průběh nasycení – bentonit se hydratuje od dolní části, kudy puklina prochází. Výrazný vliv na hydrataci má i saturace povrchem bentonitu ve vrtu, který je v kontaktu s okolní horninou. Jak je patrné i z Obr. 6.17, tak vrt je z velké části saturován již v čase 3,2 let. V Tab. 6.6 jsou uvedeny časy dosažení jednotlivých stupňů saturace pro oba materiály i obě šířky pukliny, přičemž předpokládáme, že v uvedeném čase dosahuje celý vrt alespoň uvedeného stupně nasycení. Bentonit je hydratován na 50 % již za 174 dní, na



Obr. 6.17: 3D geometrie HM modelu se znázorněním vrtu a pukliny (vlevo), průběh saturace bentonitu s puklinou znázorněný v čase 0,3 až 3,2 let v řezu vedeném osou vrtu a rovnoběžně s čelní stěnou modelu (vpravo, zobrazení horniny je v tomto pohledu vypnuto)

Tab. 6.6: Časy dosažení 50%, 75% a 90% saturace pro dvě různé varianty modelu lišící se tloušťkou pukliny pro 3D HM model

Varianta pukliny	Puklina 5 cm	Puklina 10 cm
$S_t = 50 \%$	174 dní	174 dní
$S_t = 75 \%$	1,4 roku	1,4 roku
$S_t = 90 \%$	3,2 let	3,2 let

75 % přibližně za 1,4 roku. Z hodnot je dále patrné, že v rozlišení časových kroků, ve kterém jsme úlohu řešili (1 časový krok \doteq 58 dní), nemá šířka uvažované pukliny žádný vliv a bentonit se v modelech saturuje přibližně stejně rychle. Rozdíl by byl s největší pravděpodobností patrný při použití menšího časového kroku v simulaci.

6.6.3 Výsledky mechanické části modelu – bentonit

Vyhodnocujeme vliv hydratace bentonitu (a jeho následného bobtnání) na změnu napětového stavu v modelu. Pokud nebude řečeno jinak, jsou uvedeny hodnoty pro model s širší puklinou a materiálem „Puklina 2“. Maximální hodnoty velikosti vektoru posunutí spolu s prvním hlavním napětím a faktorem intenzity napětí (absolutní hodnota z rozdílu největšího a nejmenšího hlavního napětí) jsou uvedeny v Tab. 6.7. Maximálních hodnot dosahovaly veličiny v různých modelech v různé časové kroky, proto v jsou v tabulce uvedeny maximální hodnoty přes všechny časové kroky v bentonitu, případně v hornině (pro obě varianty materiálu i obě šířky pukliny).

Tab. 6.7: Maximální (absolutní) hodnoty velikosti vektoru posunutí (u_{sum}), první hlavní napětí a faktor intenzity napětí („Intenzita napětí“) pro obě varianty puklinového materiálu („Puklina 1“ a „Puklina 2“) a obě šířky pukliny ve 3D HM modelu

Materiál	Typ	u_{sum} (m)	první hl.napětí (MPa)	Intenzita napětí (MPa)
puklina 5 cm				
Bentonit	Puklina 1	$6,42 \cdot 10^{-3}$	3,41	2,12
	Puklina 2	$1,34 \cdot 10^{-2}$	4,13	2,13
Hornina	Puklina 1	$2,26 \cdot 10^{-5}$	11,61	14,33
	Puklina 2	$1,15 \cdot 10^{-4}$	39,37	42,39
puklina 10 cm				
Bentonit	Puklina 1	$6,54 \cdot 10^{-3}$	3,39	2,07
	Puklina 2	$2,01 \cdot 10^{-2}$	3,39	2,07
Hornina	Puklina 1	$3,16 \cdot 10^{-5}$	13,61	16,04
	Puklina 2	$1,14 \cdot 10^{-4}$	36,54	37,87

K hlavním posunům dochází v bentonitu v okolí pukliny, přičemž složky vektoru posunutí ve směrech osy x a y dosahují vyšších hodnot, zatímco z -složky jsou asi třikrát nižší (orientace souřadné soustavy je patrná z Obr. 6.17). Obr. 6.18 v řezu jsou patrné pouze vyšší hodnoty pro u_x složku, maximální hodnoty složky u_y by byly zřetelné v jiném řezu. Takto popsané rozložení posunů odpovídá nehomogenitě v syčení bentonitu v radiálním směru. Vyšší maximální hodnoty velikosti vektoru posunutí bylo dosaženo v bentonitu – přibližně 0,6 až 2 cm v závislosti na materiálu a šířce pukliny, hodnoty v hornině byly stokrát až tisíckrát nižší (0,02 až 0,1 mm) s vyššími hodnotami posunů v režimu puklinového materiálu „Puklina 2“, viz Tab. 6.7.

Faktor intenzity napětí je ve všech případech o jeden řád vyšší v hornině než v bentonitu, přičemž pro bentonit je ve všech variantách přibližně stejně velký (2 MPa), jak je vidět i na Obr. 6.18. V hornině v režimu materiálu pukliny „Puklina 1“ dosahuje dvakrát až třikrát nižších hodnot než v režimu „Puklina 2“. Podobně jako faktor intenzity napětí se chová i první hlavní napětí, viz Tab. 6.7.

Dominantní složky tenzoru napětí jsou v převážné většině tlakové a dosahují vyšších hodnot (v absolutní hodnotě) ve vrchní části vrtu, což reprezentuje snahu bentonitu bobtnat, které svou přítomností brání hornina obklopující vrt. Rozložení napětí v dolní části vrtu je výrazně nesymetrické díky poloze pukliny. Složky s_{xx} , s_{yy} a s_{zz} dosahují obdobných maximálních hodnot (v absolutní hodnotě), smykové složky jsou přibližně pětikrát nižší.

6.6.4 Výsledky mechanické části modelu – horninová matrice

Hodnoty vektoru posunutí v horninové matici (Tab. 6.7, Obr. 6.18) jsou o dva až tři řády nižší než v bentonitu, což odpovídá rozdílu hodnot Youngova modulu pružnosti. Podobně jako pro bentonit zde platí, že vertikální složka (z -složka), je nižší než složky vektoru posunutí v x - a y -směru. Rozložení složek vektoru posunutí také odpovídá snaze bentonitu zvětšovat svůj objem a stlačovat přitom okolní horninu.

Rozložení pole napětí v hornině je ovlivněno přítomností pukliny, všechny maximální hodnoty (v absolutní hodnotě) složek tenzoru napětí byly detekovány v blízkosti pukliny (v těchto místech také dochází k největšímu rozsahu bobtnání bentonitu). Je zde však poměrně složité určit, co představuje singularitu v blízkosti rozhraní bentonit-hornina-puklina a co jsou účinky bobtnání. Složky s_{xx} a s_{yy} vykazují vyšší hodnoty v tahovém namáhání než v tlakovém, s_{zz} pak celkově nižší hodnoty oproti s_{xx} a s_{yy} . Smykové namáhání bylo obdobné pro všechny směry, s vyššími hodnotami složky s_{xy} .

Varianty modelů se dvěma různými efektivními tuhostmi materiálu pukliny vykazovaly řádové rozdíly v hodnotách složek vektoru posunutí v tečném směru na puklinu. Posunutí v tečném směru na puklinu bylo vyhodnocováno pomocí závislosti na vzdálenosti směrem od vrtu po puklině. Hodnoty maximálních posunů na puklině se pohybují okolo 2 až 6 μm , přičemž pro materiál „Puklina 1“ v rozmezí 2,04 až 2,54 μm a pro materiál „Puklina 2“ mezi 4,55 až 6,08 μm – nižší hodnoty rozmezí odpovídají užší šířce pukliny. Na Obr. 6.19 jsou zobrazeny výše uvedené průběhy pro materiál „Puklina 2“ a puklinu širokou 10 cm. Vyneseny jsou posunutí v otočeném souřadném systému v závislosti na vzdálenosti na horním i dolním povrchu pukliny, vlevo pro levou část pukliny a vpravo pro pravou část pukliny.

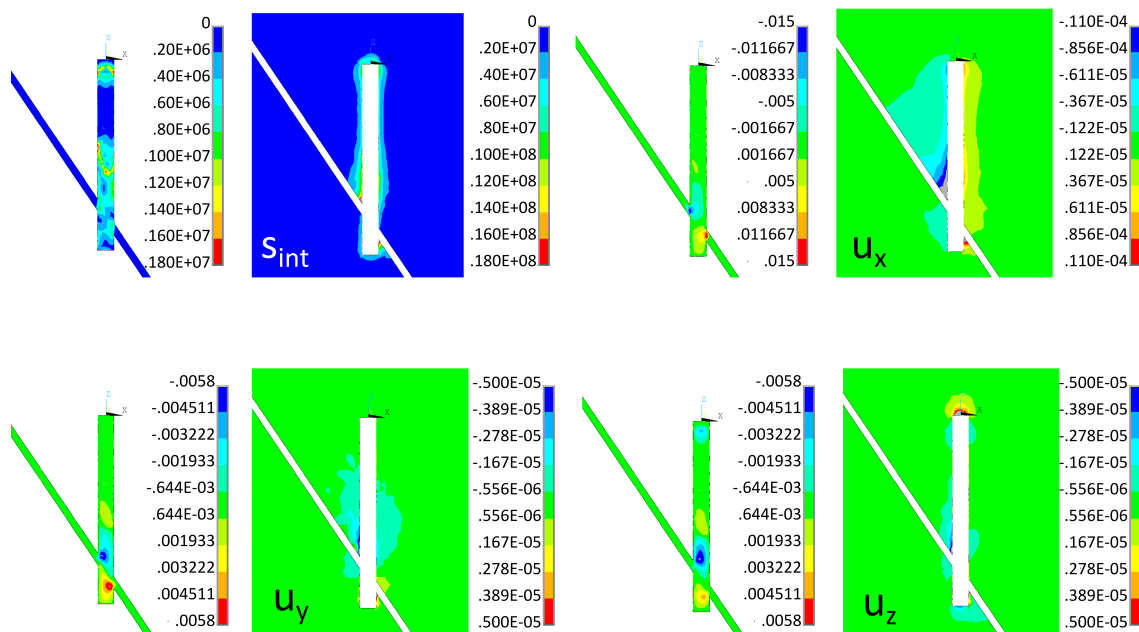
Z grafů je patrný výraznější posun vždy pouze na jednom rozhraní puklina-hornina, což ukazuje, že se po puklině bloky horniny smýkají. V tomto modelu bylo dosaženo nejvyššího maxima o hodnotě 6,08 μm bezprostředně na rozhraní puklina-bentonit a poté došlo ke strmému poklesu po puklině směrem od vrtu. Hodnota tečného posunutí ve vzdálenosti 1 m od vrtu dosahuje hodnoty 0,19 μm . Identifikovatelné hodnoty byly dosaženy nalevo do vzdálenosti asi 3 m, napravo pouze do 0,5 až 1 m od vrtu, což je dáno blízkou vzdáleností okraje modelu a kratší délkou pravé části pukliny.

6.6.5 Vyhodnocení

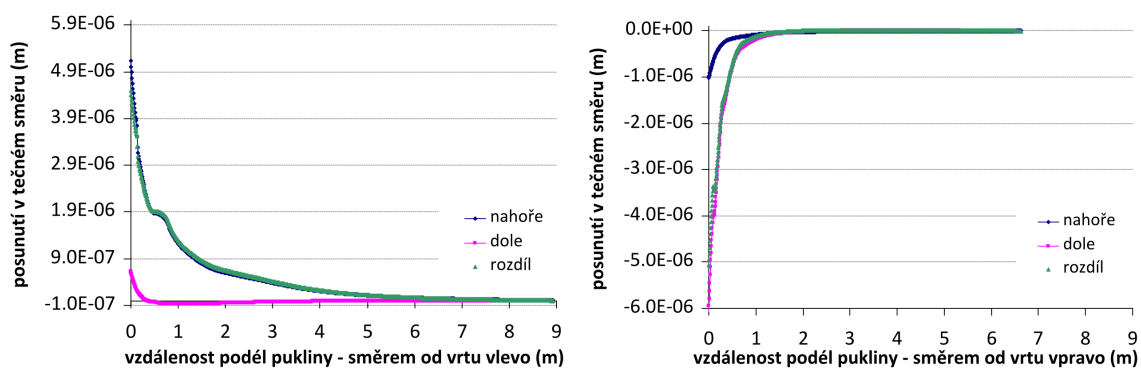
Cílem této kapitoly byla simulace sdruženého HM chování bentonitu ve vrtu obklopeném horninovou maticí s puklinou vedenou v netriviálním směru podle reálné geometrie experimentu BRIE. Obecná poloha pukliny způsobuje nehomogenní a nerovnoměrnou hydrataci bentonitu a následně jeho nerovnoměrné bobtnání ve vrtu, které ovlivňuje napjatost horniny. Simulací navazujeme na úlohy nehomogenní hydratace, jejichž detailní popis je uveden v kapitole 6.5 a byl publikován v [77]. Ukázali jsme, že tento relativně složitý a výpočetně náročný problém je možné řešit pomocí nelineární elasticity spolu s difúzní rovnicí s nelineární difuzivitou, ale je nutné uvažovat všechna omezení, která přináší (např. zjednodušený popis mechanického

chování bentonitu, popis horninové matrice s puklinou jako kontinuum atd.).

Z hydraulických výsledků modelů je patrné, že šířka pukliny (ve variantách 5 cm a 10 cm) v řešeném rozlišení časových kroků neovlivňuje hydrataci bentonitu v takové míře, aby se to projevilo na časech dosažení vybraných stupňů saturace – pro oba případy je bentonit z velké části hydratovaný za 3 roky. Mechanické výsledky potvrzují nerovnoměrné bobtnání bentonitu jako následek hydratace, které je nejvýraznější v okolí zdroje vody – pukliny. Nejvyšší posunutí v bentonitu činí asi 1 až 2 cm, v hornině desetiny až setiny mm.



Obr. 6.18: Intenzita napětí (s_{int}) a složky vektoru posunutí u_x , u_y a u_z pro bentonit s puklinou a pro horninu, části modelu jsou zobrazeny v řezu a zvlášť pro horninu a pro bentonit s puklinou kvůli řádově odlišným hodnotám (zobrazená varianta s materiálem „Puklina 2“ a puklinou o šířce 10 cm)



Obr. 6.19: Grafy závislosti posunutí v tečném směru na vzdálenosti směrem vpravo a vlevo od vrtu, „nahore“: průběh na horním okraji pukliny, „dole“: průběh na dolním okraji pukliny, „rozdíl“: rozdíl průběhu na horním a dolním okraji pukliny

7 Modelování hydratace bentonitu podle experimentu Prototype Repository

V druhé části se pomocí analogického postupu, který jsme využili v předchozí kapitole, snažíme vystihnout chování bentonitu v sérii modelů vycházejících z dalšího in situ experimentu Prototype Repository. Jeho stručný popis bude uveden v kapitole 7.1 spolu s informacemi o měřených datech, která dále využijeme v numerických simulacích nebo k porovnání výsledků.

Jako úvodní výpočty byly v minulosti spolupracovníky autorky provedeny některé související simulace. Řešeny byly modely vedení tepla v okolí vrtů PR v rámci projektu TF EBS pomocí výpočetního nástroje ANSYS (J. Novák, popsáno ve zprávě [96]). Jejich výsledky (průběhy teploty v okolí ukládacích vrtů) byly porovnány s poměrně dobrou shodou s měřenými daty. Další simulace popisovaly proudění vody v nasyceném prostředí s uvažováním nejdůležitějších hydrogeologických struktur a měly za úkol odhadnout přítoky do jednotlivých vrtů a celkový režim proudění vody v okolí PR. Výpočty byly provedeny rovněž pro projekt TF EBS (D. Frydrych) na geometrii vytvořené v softwarovém nástroji SALOME [54] v programu Flow123d [12] a jsou rovněž uvedeny v [96] a s upřesněnými polohami puklin v [94].

Zabýváme se podobně jako u modelů experimentu BRIE procesem saturace bentonitu, kde se pomocí numerických simulací snažíme přiblížit měřeným datům, přispět k porozumění chování bentonitu při hydrataci a v malé míře také predikovat proces jeho syčení v HÚ. Simulacemi uvedenými v této práci navazujeme na výše uvedené tepelné a hydraulické modely, i když je přímo nevyužíváme. Určité poznatky – např. přítoky do jednotlivých vrtů spolu s měřenými daty, však slouží jako zpětná kontrola konzistence simulací hydratace bentonitu.

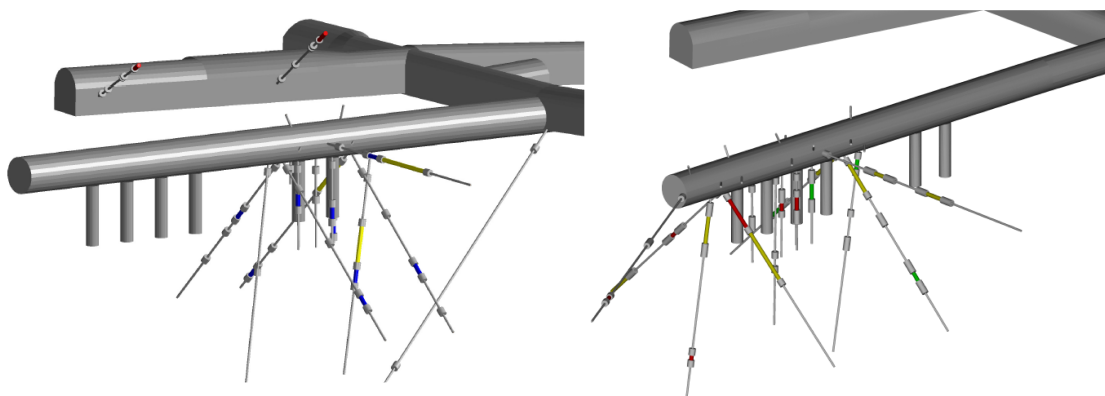
7.1 Popis experimentu Prototype Repository (PR)

Prototype Repository (PR) je ojedinělý experiment realizovaný v reálném měřítku, který se snaží vystihnout chování hlubinného úložiště KBS-3V koncepce v podmínkách podzemní laboratoře Äspö ve Švédsku. PR zahrnuje všechny přírodní i inženýrské bariéry, neobsahuje však žádný zdroj radioaktivity, přičemž tepelný výkon VJP simulují instalovaná topidla. Oproti výše uvedenému experimentu BRIE se snaží procesy v HÚ postihnout v celé komplexnosti a ve větším měřítku. Kvůli měnící se teplotě nejsou v PR uvažovány izotermické podmínky a zároveň díky monitoringu různých mechanických veličin je zde i prostor pro zkoumání procesu bobtnání ben-

tonitu. Liší se také průběhem experimentu, jeho dobou trvání a postupem při jeho rozebrání. Podobně jako experiment BRIE, uvažuje nehomogenní přítok podzemní vody do bentonitu přes mapované diskontinuity.

Experiment je tvořen dvěma částmi instalovanými již během let 2001 a 2003. Část 1 se skládá ze čtyř ukládacích vrtů v reálném měřítku, v nichž jsou uloženy měděné kanystry vybavené topidly, která simulují tepelný výkon VJP. Kanystry jsou obklopeny bentonitovými bloky a peletami a celé ukládací tunely jsou zavezeny směsí bentonitu a rozdrčené horniny a zaplombovány betonovými zátkami. Část 2 obsahuje dva vrty, zavezený ukládací tunel a také končí betonovou zátkou. Experiment je ve čtyřech ukládacích vrtech a okolní hornině vybaven řadou senzorů pro sledování THM veličin (měření teploty, tlaku vody, celkového tlaku, relativní vlhkosti, rezistivity, posunutí kanystru a napětí v hornině). Ukládací vrty vykazují různé hodnoty přítoků, podle provedených měření, která jsou specifikována v kapitole 7.1.1, jsou v rozmezí od $7 \cdot 10^{-4}$ do $8 \cdot 10^{-2} \text{ l} \cdot \text{min}^{-1}$.

Během roku 2011 byly dva vrty experimentu demontovány, rozebrány a následně byla vyhodnocována měřená data. Porovnání se simulovanými daty jsou uvedena v kapitole 7.2, využívali jsme přitom obzvláště různá měření přítoků, která byla provedena ve vrtech různými způsoby před samotnou instalací experimentu [57]. Další informace o experimentu a jeho výsledcích jsou k dispozici ve zprávách švédské SKB, např. [32], [42] a [52].



Obr. 7.1: Schematické znázornění senzorů umístěných v okolí vrtů a ukládacích tunelů experimentu Prototype Repository, převzato z [4] a upraveno

7.1.1 Popis vybraných měření provedených v rámci experimentu Prototype Repository

V rámci experimentu PR byla provedena řada nejrozličnějších měření, ať před instalací nebo po rozebrání experimentu. Uvedeme zde ta, která jsme v simulacích využili, ať pro účely definice modelů, nebo k porovnání s výsledky simulací. Budeme se zaměřovat na dva hlavní vrty (vrt č.5 – DA3551G01 a vrt č.6 – DA3545G01), na

kterých probíhal v největší míře monitoring a zároveň byly uvažovány jako hlavní vrty pro detailnější simulace.

Měření přítoků do vrtů pomocí savého materiálu

První měření zkoumá přítoky do obou vrtů prostřednictvím měření pomocí savého materiálu jako se používá např. do běžných dětských plenek. Plenky byly před instalací na stěny vrtu zváženy a po 6 až 8 dnech vyjmuty a znovu převáženy, aby bylo možné určit celkový přítok do vrtů. Výstupy z měření přítoku do vrtů – barevné mapy zobrazující průměrný přítok v daném místě pomocí mřížky jsou uvedeny v příloze E, detailní popis experimentu spolu s výsledky a odvozenými závěry popisuje zpráva [26].

Výstupy experimentu byly použity v níže popsanych simulacích pro definici polohy pro předpis okrajových podmínek. Avšak byly nutné brát v úvahu i určité nepřesnosti, které mohly při měření nebo interpretaci jeho výsledků vzniknout:

- nepřesnosti v poloze přítoků kvůli možnému stékání vody po stěnách vrtů,
- nepřesnosti v množství a rozložení přítoků (vnitřní povrch vrtů nebyl pokryt plenkami celý – instalovány byly dva pásy o přibližném obsahu 75 % plochy pláště).

Měření celkových přítoků do ukládacích vrtů

Další měření, která v simulacích využíváme, odhadují celkové přítoky do ukládacích vrtů (způsob měření přítoku není blíže specifikován). Měření probíhala ve třech obdobích roku 1999 a 2000, přičemž pro oba vrty jsou autory doporučovány považovat za nejvíce reprezentativní hodnoty z druhého období. V ostatních periodách bylo možné, že určitý objem vody unikál během měření z podlahy tunelu, ale během března 2000 došlo k jejímu utěsnění. Hodnoty přítoků do ukládacích vrtů DA3551G01 a DA3545G01 pro všechna měření jsou uvedeny v Tab. 7.1 a je z nich patrné, že v obou vrtech dosahují řádově stejných hodnot. Další informace o provedeném měření jsou uvedeny v [57].

Tab. 7.1: Výsledky měření přítoků do vrtů experimentu Prototype Repository, tučně zvýrazněné hodnoty můžeme považovat za nejvíce reprezentativní, 1.období: 1999-12-08 až 1999-12-13, 2.období: 2000-03-28 až 2000-03-31, 3.období: 2000-07-13 až 2000-07-26, *celkový přítok – součet přítoků ze všech šesti vrtů experimentu, převzato z [57] a upraveno

Vrt	1.období $Q \text{ (l} \cdot \text{min}^{-1})$	2.období $Q \text{ (l} \cdot \text{min}^{-1})$	3.období $Q \text{ (l} \cdot \text{min}^{-1})$
DA3551G01	0,00270	0,00155	0,00160
DA3545G01	0,00610	0,00270	0,00740
CELKEM*	0,09392	0,08825	N/A

Měření přítoků do ukládacích vrtů puklinami

Během začátku roku 2000 bylo provedeno mapování propustných puklin, na přelomu března a dubna 2000 pak měření přítoků jednotlivými propustnými puklinami [57], kde jsou zobrazeny i jednotlivé mapy zachycující průmět puklin na povrch vrtu.

Měření byla provedena aplikací plastových sáčků na povrch horniny, které sloužily k zachytávání vody ze zmapovaných puklin. Každý den během měsíčního měření byla voda shromažďována a byl měřen její objem. V Tab. 7.2 jsou uvedeny jednak dílčí přítoky jednotlivými puklinami, jednak jejich součet v celém vrtu.

Tab. 7.2: Výsledky měření přítoků do vrtů experimentu Prototype Repository pomocí zmapovaných propustných puklin, uvedeny jsou pouze hodnoty pro dva vrty experimentu, převzato z [57] a upraveno

Číslo pukliny	$Q_{DA3551G01} (\text{l} \cdot \text{min}^{-1})$	$Q_{DA3545G01} (\text{l} \cdot \text{min}^{-1})$
1	$2,84 \cdot 10^{-5}$	$5,45 \cdot 10^{-6}$
2	$2,59 \cdot 10^{-5}$	$4,16 \cdot 10^{-5}$
3	$3,49 \cdot 10^{-5}$	$2,17 \cdot 10^{-4}$
4	$8,63 \cdot 10^{-6}$	$3,85 \cdot 10^{-5}$
5	$1,94 \cdot 10^{-5}$	0
6	$1,05 \cdot 10^{-5}$	$2,03 \cdot 10^{-5}$
7	$1,12 \cdot 10^{-4}$	$2,24 \cdot 10^{-4}$
8	$1,19 \cdot 10^{-4}$	$3,96 \cdot 10^{-6}$
9	0	$3,22 \cdot 10^{-5}$
10	—	$1,16 \cdot 10^{-5}$
CELKEM	$3,59 \cdot 10^{-4}$	$5,95 \cdot 10^{-4}$

Měřená data ze senzorů v bentonitu

V obou uvažovaných vrtech bylo instalováno velké množství senzorů (pro měření teploty, relativní vlhkosti, tlaku). Vyhodnocená data po rozebrání experimentu byla dána členům TF EBS k dispozici k porovnání s výsledky numerických simulací. Konkrétně využíváme data vyjadřující závislosti RH na čase (v různých pozicích ve vrtech), barevné mapy zobrazující stupeň saturace v jednotlivých místech příčných řezů bentonitem (tato obrazová data vznikla z naměřených bodových dat a rovněž byla poskytnuta členům TF EBS). Průběhy RH, ani mapy s rozložením stupně saturace v řezech v této části nebudeme uvádět, budou připojeny k výsledkům numerických simulací k porovnání.

7.2 Modely hydratace bentonitu v ukládacích vrtech DA3551G01 a DA3545G01

Podobně jako u modelů experimentu BRIE v kapitole 6 simulujeme a vyhodnocujeme hydrataci bentonitu v ukládacích vrtech experimentu. V případě Prototype Repository máme k dispozici více naměřených dat – pro definici modelu data obzvláště z období před instalací experimentu, pro jeho vyhodnocení a pro porovnání data ze senzorů v bentonitu po jeho rozebrání. Konkrétně využíváme měření přítoku pomocí absorpčního materiálu pro určení polohy předepsané okrajové podmínky a další popsání měření přítoku (kapitola 7.1.1) pro určení velikosti dané okrajové podmínky.

Již v předchozích částech bylo naznačeno, že se zaměřujeme na dva vrty (DA3551G01 a DA3545G01), protože je pro ně dostupné největší množství dat a celkově jsou preferovány v rámci detailních simulací experimentu PR.

7.2.1 Popis modelů

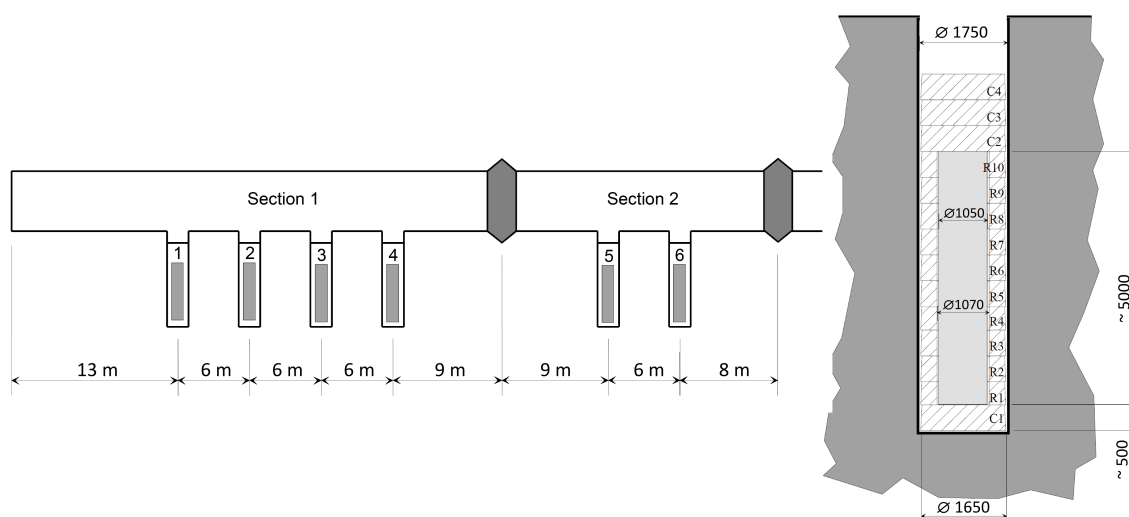
V modelech uvažujeme vrty v geometrii, která je plánována pro použití v reálném HÚ a takto je realizována i v experimentu. Oba modely mají hloubku 8 m a průměr 1,75 m a jsou vyplněné bentonitem s prázdným prostorem místo kanystru. Kanystř, jenž je v experimentu nahrazen topidlem (o průměru 1,05 m a výšce 5 m), není nutné do geometrie zahrnovat, protože řešené modely simulují pouze hydrauliku bez vedení tepla. Válcové bloky bentonitu umístěné nad a pod kanystrem (v experimentu označené jako C1 až C4) a prstence bentonitu obklopující kontejner (R1 až R10) jsou v modelech nahrazeny homogenním materiálovým prostředím. Prázdný prostor v horních částech vrtu, který je na Obr. 7.2 znázorněn, musíme v simulovaných případech také vyplnit bentonitem, aby hloubka vrtu odpovídala realitě. Okolní hornina, podobně jako u modelů experimentu BRIE, není v modelech zahrnuta, snažíme se ale její vliv na proces hydratace vystihnout pomocí okrajových podmínek.

Konečně-prvkové síť pro oba vrty byly definovány tak, aby na jejich povrch bylo možné snadno předepsat okrajovou podmínku prostorově rozloženou podle změřených dat z mřížky podle testu popsaného v kapitole 7.1.1. Síť jsou tvořeny nepravidelnými šestistěny, z nichž ty, které leží na okraji oblasti, mají po pomyslném rozvinutí pláště představující povrch vrtu tvar čtverce o straně 12,5 cm. Počet uzlů v takto definovaných modelech je přibližně 10 tisíc, počet elementů asi 8 tisíc.

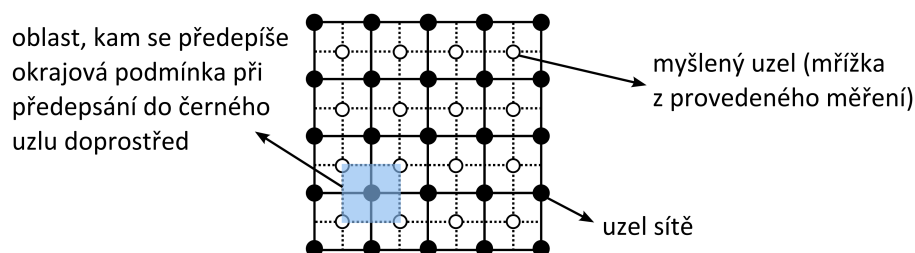
Počáteční podmínka odpovídá rozložení stupně saturace v bentonitu na počátku experimentu: v horní a dolní části je bentonit saturován na 77,8 % (bloky C1 až C4) a ve střední části na 84,1 % (prstence R1 až R10, což odpovídá hloubkám 2,5 m až 7,5 m).

Materiálový model

Materiálový model nebyl v zadání [46] konkrétně specifikován, v modelech je tedy použit shodný materiálový model definovaný pro bentonit v modelech k experimentu BRIE. Hydrataci bentonitu řešíme pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou



Obr. 7.2: Schéma experimentu Prototype Repository s detailem ukládacího vrtu s označením bentonitových bloků, převzato z [46] a upraveno



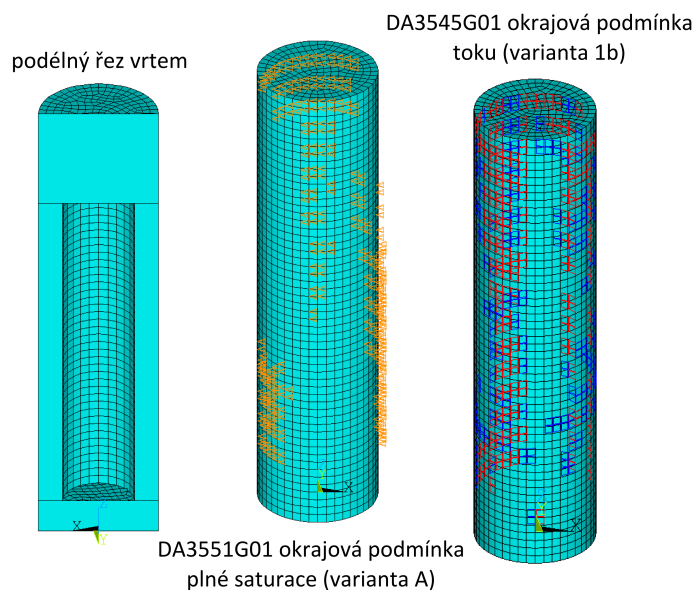
Obr. 7.3: Znázornění tzv. duální sítě pro předpis okrajových podmínek v modelech podle experimentu Prototype Repository

v závislosti na stupni saturace. Difuzivita je zadána podle vztahu (3.10) s dosazenými hodnotami materiálových parametrů podle Tab. 3.2.

7.2.2 Varianty okrajových podmínek

Okrajové podmínky jsou předepisovány pomocí tzv. duální sítě zobrazené na Obr. 7.3, kde černé body představují skutečné uzly konečně-prvkové sítě a prázdné – bílé uzly reprezentují jednotlivé vrcholy modrých čtverečků zobrazených v měření se savým materiálem (příloha E). Chceme-li tedy předepsat okrajovou podmínku do čtverečku s bílými vrcholy podle provedeného měření, stačí ji podle obrázku zadat do černého bodu uprostřed tohoto čtverce. Ve skutečném provedení je výpočetní síť definovaná s jemnějším rozlišením, než je mřížka použitá v měřeních – proto jeden čtvereček z měření odpovídá čtyřem čtverečkům sítě.

Řešíme dva základní případy (s řadou konkrétních variant, které budou specifikovány níže) lišící se předepsanými okrajovými podmínkami. Porovnáváme rychlost



Obr. 7.4: Výpočetní síť pro vrty experimentu Prototype Repository se zobrazením prázdného prostoru místo kanystru a zadaných okrajových podmínek u dvou vybraných variant

sycení a rozložení stupně saturace, podobně jako u modelů experimentu BRIE.

- **Předepsaná okrajová podmínka plné saturace:** tato varianta předpokládá, že v místech, kde byl detekován přítok do vrtu pomocí experimentů, předepíšeme Dirichletovu okrajovou podmínku $S_l = 100 \%$. Takto předepsaná okrajová podmínka v daném místě odpovídá neomezenému zdroji vody.
- **Předepsaná konstantní hodnota toku:** předepisujeme okrajovou podmínku druhého druhu – konkrétní hodnotu toku, kterou jsme odvodili z dalších měření přítoků do vrtů (z měření celkových přítoků do ukládacích vrtů a měření přítoků do ukládacích vrtů puklinami, kapitola 7.1.1). Na rozdíl od plné saturace zde můžeme rozlišit intenzitu přítoku v daném místě. Tato varianta byla řešena pro několik případů podle naměřeného přítoku do vrtů v uvedených experimentech, Tab. 7.4.

Popis jednotlivých variant modelů

Pro přehlednost uvedeme jednotlivé varianty modelů, které řešíme pro oba vrty rozlišené podle předepsaných okrajových podmínek. Modely s okrajovou podmínkou plné saturace simulujeme ve variantách A a B, které se liší pozicí předepsané okrajové podmínky. Modely s okrajovou podmínkou předepsaného toku uvažujeme ve variantách 1a, 1b, 1c a 2a, 2b a 2c, kde číslo označuje měření, z něhož byla hodnota toku odvozena a písmeno určuje místa, kam se okrajová podmínka předepíše.

- **varianta A:** předepsaná podmínka plné saturace na místech, kde byl detekován přítok do vrtu v testech se savým materiálem, do modelu přitom zahrnu-

jeme pouze pozice s přítokem $10^{-6} \text{ l} \cdot \text{min}^{-1}$ a vyšším, tj. tmavě a světle modré čtverečky v mapách z přílohy E,

- **varianta B:** okrajová podmínka $S_l = 100 \%$ je předepsaná na čtverečky mřížky, které odpovídají pozicím puklin uvedených v příloze E (jsou zde označeny čísly 1 až 9 u vrtu DA3551G01 a čísly 1 až 10 u vrtu DA3545G01).

Pro varianty předepsaného toku je třeba hodnotu okrajové podmínky nejprve vyčíslit. Okrajovou podmínku získáme z informací o přítocích do obou vrtů uvedených v Tab. 7.4, podle doporučení jsme počítali s nejvíce reprezentativními hodnotami ze dvou různých měření (kapitola 7.1.1), která jsme popsali výše:

- **měření 1:** označuje hodnoty celkových přítoků do jednotlivých vrtů,
- **měření 2:** označuje hodnoty přítoků do vrtů jednotlivými puklinami.

Modely obou vrtů s okrajovou podmínkou předepsaného toku jsme řešili ve třech možných variantách, přičemž okrajovou podmínku je nutné do softwaru ANSYS zadat ve tvaru hodnoty toku na m^2 (Tab. 7.4 „Předepsaný tok“), který je rozlišen podle toho, kam se hodnoty jeho hodnoty předepisují:

- **varianta a:** popisuje případ, kdy uvažujeme naměřenou hodnotu přítoku do celého vrtu, kterou rozpočítáme do jednotlivých čtverečků podle mřížky experimentu se savým materiálem, přičemž nerozlišujeme intenzitu toku a uvažujeme pro předepsání pouze světle a tmavě modré čtverečky. Tab. 7.4 udává hodnoty přepočtené do tvaru, do kterého se zadává jako okrajová podmínka do softwaru ANSYS,
- **varianta b:** představuje případ, kdy naměřený přítok do vrtu rozpočítáme do čtverečků stejně jako ve variantě a, ale bereme v úvahu, že světle modré čtverečky představují 10krát nižší tok než čtverečky tmavě modré, proto jsou v Tab. 7.4 dvě různé hodnoty pro variantu b),
- **varianta c:** odpovídá variantě a, přičemž celkový přítok do vrtu nerozpočítáváme na všechny čtverečky podle plenkového testu, ale pouze na ty, které se překrývají s polohami propustných puklin. Ty jsou zobrazeny také na mapách v příloze E pomocí čísel 1 až 9 pro vrt DA3551G01 a 1 až 10 pro vrt DA3545G01 (tento případ je analogický k variantě A).

Plocha, na kterou je daný přítok rozpočítán je určena podle počtu čtverečků podle Tab. 7.3. Počty světlých a tmavých čtverečků značí přepočtenou hodnotu podle elementů sítě, které jsou definovány s menším rozlišením než je použité v mřížce v měření v příloze E. Světle modré čtverečky odpovídají v příloze E toku 10^{-6} až $10^{-5} \text{ l} \cdot \text{min}^{-1}$, tmavě modré čtverečky toku 10^{-5} až $10^{-4} \text{ l} \cdot \text{min}^{-1}$ (tyto hodnoty zde uvádíme pro přesnější identifikaci pozic, v modelech je nijak nevyužíváme).

Tab. 7.3: Počet a celková plocha elementů pro předpis okrajové podmínky v modelech Prototype Repository, hodnoty jsou uvažovány po přepočtení na konečně-prvkovou síť modelu, „Světlé“ a „Tmavé“ označují světle a tmavě modré čtverečky mřížky, „Podle puklin“ značí čtverečky mřížky odpovídající polohám puklin

		DA3551G01	DA3545G01
Počet čtverečků	Světlé	138	238
	Tmavé	190	302
	CELKEM	328	540
	Podle puklin	35	23
Plocha čtverečků (m ²)	Světlé	2,156	3,719
	Tmavé	2,969	4,719
	CELKEM	5,125	8,438
	Podle puklin	0,547	0,359

7.2.3 Vyhodnocení výsledků pro jednotlivé varianty

Podobně jako u simulací experimentu BRIE vyhodnocujeme rychlost a průběh hydratace obou uvažovaných vrtů v závislosti na aplikovaných okrajových podmínkách. Sledujeme saturaci vrtu ve dvou podélných, vzájemně kolmých řezech v čase 8 let a ve stejném časovém kroku i příčně vedené řezy každým z bloků a prstenců v polovině jejich výšky, jednotlivé bloky bentonitu jsou zobrazeny na Obr. 7.2.

Výsledky modelů také porovnáváme s experimentálními daty (měřenými daty ze senzorů v bentonitu), jejichž krátký popis je uveden v části 7.1.1. Srovnáváme příčné řezy každým z bloků/prstenců, na kterých jsou znázorněna rozložení stupně saturace. Pro porovnání využíváme také změřené průběhy relativní vlhkosti v definovaných pozicích senzorů, které je však nejprve třeba získat převedením ze stupně saturace.

Výsledky pro modely s okrajovou podmínkou plné saturace

Modely s okrajovou podmínkou plné saturace jsme řešili ve dvou variantách podle pozice předepsané okrajové podmínky (varianta A: mřížka testu se savým materiálem, varianta B: polohy puklin). Už z map získaných z měření v příloze E je patrné, že se polohy propustných puklin a polohy detekovaného přítoku v experimentech s absorpčním materiálem příliš neshodují. U vrtu DA3551G01 odpovídá pouze poloha pukliny č.7 a 8 částečně č.9, ostatní jsou posunuté směrem doleva (směr uvažujeme podle obrázku v příloze E). Ve vrtu DA3545G01 je až na jednu výjimku většina puklin koncentrovaných v dolní části vrtu, naproti tomu světle a tmavě modré čtverečky jsou rozmístěny po celém povrchu vrtu.

Výše popsané chování potvrzují také grafická znázornění stupně saturace na povrchu modelu a ve dvou podélných řezech uvedená v příloze F. Rozložení stupně saturace v modelu vrtu DA3551G01 ukazují, že model ve variantě B se po 8 letech

Tab. 7.4: Jednotlivé hodnoty toků předepsané v simulovaných variantách a, b, c jako okrajové podmínky pro naměřené hodnoty přítoku do obou vrtů, * hodnoty toku odpovídají tmavě resp. světle modrým čtverečkům, podrobněji v 7.2.2

		DA3551G01		DA3545G01	
		Měření 1	Měření 2	Měření 1	Měření 2
Naměřený přítok	(l·min ⁻¹)	1,55 · 10 ⁻³	3,59 · 10 ⁻⁴	2,70 · 10 ⁻³	5,95 · 10 ⁻⁴
	(m ³ ·s ⁻¹)	2,58 · 10 ⁻⁸	5,98 · 10 ⁻⁹	4,50 · 10 ⁻⁸	9,92 · 10 ⁻⁹
	Varianta a	5,04 · 10 ⁻⁹	1,17 · 10 ⁻⁹	5,33 · 10 ⁻⁹	1,18 · 10 ⁻⁹
Předepsaný tok(m·s ⁻¹)	Varianta b*	8,11 · 10 ⁻⁹	1,88 · 10 ⁻⁹	8,84 · 10 ⁻⁹	1,95 · 10 ⁻⁹
		8,11 · 10 ⁻¹⁰	1,88 · 10 ⁻¹⁰	8,84 · 10 ⁻¹⁰	1,95 · 10 ⁻¹⁰
	Varianta c	4,72 · 10 ⁻⁸	1,09 · 10 ⁻⁸	1,25 · 10 ⁻⁷	2,76 · 10 ⁻⁸

nestihl příliš hydratovat, model ve variantě A pouze částečně ve střední části. Tyto rozdíly jsou samozřejmě dány odlišně velkou plochou, na kterou je okrajová podmínka předepsána (rozdíl je téměř desetinásobný). Ještě větší odlišnosti vykazují modely vrtu DA3545G01, kde je rozdíl ploch téměř pěťadvacetinásobný. Ve variantě A je model ve velké míře saturovaný s výjimkou dolní části, ve variantě B je naopak dolní část díky polohám puklin hydratovaná nejvíce.

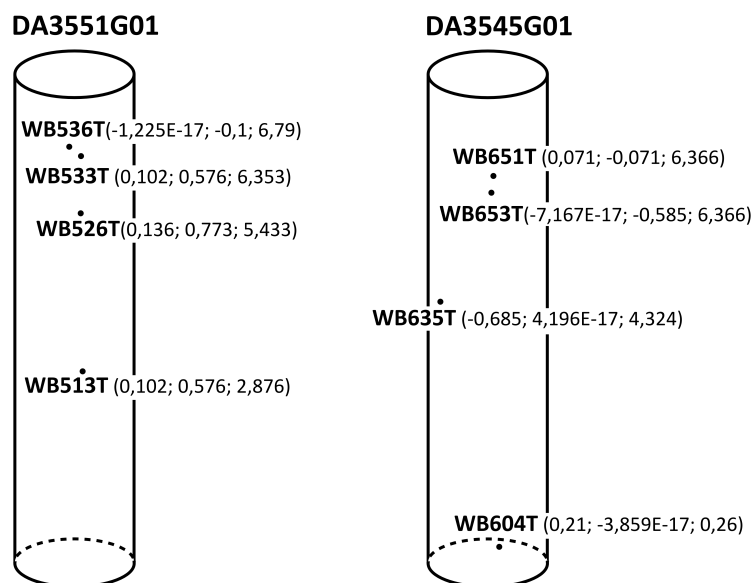
V příloze E jsou dále uvedeny příčné řezy vedené v polovině výšky vybraných bloků nebo prstenců (označení podle Obr. 7.2: C1, R5, R7 a C2). Při jejich porovnání s obrázky získanými z měřených hodnot je ještě více zřetelný rozdíl v rozložení stupně saturace. Varianta A i varianta B u vrtu DA3551G01 jsou hydratované v mnohem menší míře, než bylo zjištěno experimentálně. Vrt DA3545G01 ukazuje lepší shodu, ale pouze pro variantu A, ve variantě B je nasycení bentonitu silně podhodnocené podobně jako u předchozího vrtu.

Ve vybraných příčných řezech se opět lépe shodují modely vrtů ve variantě A, je u nich vidět kvalitativně, v některých případech i kvantitativně podobné rozložení nasycení. Saturace modelů ve variantě B opět potvrzuje podhodnocení výsledků oproti naměřeným datům.

Výsledky pro modely s okrajovou podmínkou konstantního toku

Na rozdíl od předchozích případů modely s předepsanou okrajovou podmínkou ve tvaru hodnoty toku vykazují vyšší nasycení v celém objemu vrtu. Díky nastavení modelu (okrajové podmínky) není sycení omezeno hodnotou 100 % a obzvlášť v místech, kde byla okrajová podmínka předepsána jsou jeho hodnoty vyšší. Je tedy nutné tuto odlišnost uvažovat při vyhodnocování výsledků.

Modely vrtu DA3551G01 jsou hydratovány kvantitativně v podobném rozsahu ve variantách 1a až 1c a podobně také v 2a až 2c. Liší se rozložením hydratovaných míst ve vrtu, což je dáno rozmístěním okrajové podmínky (odlišnými polohami puklin a detekovaného přítoku z testu se savým materiálem). Varianty 1a a 1b a 2a a 2b



Obr. 7.5: Pozice, ve kterých je porovnáván průběh relativní vlhkosti s naměřenými daty v obou vrtech experimentu Prototype Repository

(modely se stejnou hodnotou předepsaného toku vs. modely s dvěma velikostmi toku) jsou ve výsledku saturovány velice obdobně a předepsaný desetkrát nižší tok nijak výrazně neovlivňuje celkové nasycení.

Mezi variantami 1a a 1b pro vrt DA3554G01 také nejsou výrazné rozdíly – modely jsou saturovány v celém objemu, varianta 1c je v menší míře nasycená pouze v horní části nad pomyslným kanystrem. Díky nižším tokům předepsaným ve variantách 2a až 2c jsou modely celkově saturovány méně než varianty 1a až 1c. U variant 2a a 2b jsou patrné pozvolnější přechody mezi jednotlivými místy na povrchu vrtu i v řezech než u varianty 1c. Ty jsou dány tím, že je zde shodná celková velikost toku rozdělena na větší plochu, než je tomu u varianty 2c.

V příčných řezech je opět patrný vyšší stupeň saturace oproti naměřeným hodnotám i modelům s okrajovou podmínkou plné saturace. Rozložení stupně saturace v modelech nejlépe odpovídá naměřeným hodnotám ve variantách 2a a 2b u vrtu DA3551G01 a ve variantě 1c pro vrt DA3545G01. Varianty 1a a 1b jsou v porovnání s naměřenou hydratací saturovány výrazněji.

Porovnání časových průběhů relativní vlhkosti

V materiálech k experimentu Prototype Repository bylo specifikováno umístění senzorů relativní vlhkosti. Ve vybraných pozicích uvedených na Obr. 7.5 porovnáváme výsledky modelů s naměřenými časovými průběhy. Protože je v řídicích rovnicích modelových příkladů stavovou proměnnou stupeň saturace, bylo jej nutné nejprve pomocí inverze k retenční křivce (3.8) převést na tlak a poté na relativní vlhkost pomocí Kelvinova vztahu (3.15). Pro výpočet relativní vlhkosti je do Kelvinova

vztahu nutné dosadit také teplotu, která se s časem mění. V modelových případech ale sdružení procesu hydratace s vedením tepla neuvažujeme, proto byly převzaty průběhy teploty z provedených měření pomocí jednoduchých regresních závislostí (aproximace měřených dat polynomičnou nebo logaritmickou závislostí).

Průběhy relativní vlhkosti byly porovnány pouze pro modely s okrajovou podmínkou plné saturace předepsané na pozice detekovaných přítoků v experimentu se savým materiálem (varianta A). V této variantě totiž nejlépe odpovídá rozložení a z části míra nasycení bentonitu naměřeným datům v příčných řezech.

Při prvním porovnání průběhy relativní vlhkosti z varianty A příliš neodpovídaly naměřeným závislostem. Výrazné rozdíly byly už v počátečních hodnotách stupně saturace, které byly výrazně vyšší než předepsaná počáteční podmínka v daném místě. Proto byla pro bentonit otestována van Genuchten retenční křivka s odlišnými parametry ($P_0 = 37,273$ MPa a $\lambda = 0,2$). Použité parametry byly převzaty z modelů „Canister Retrieval Test“ [45], kde byla uvažována obdobná hodnota počátečního stupně saturace jako v experimentu Prototype Repository. V modelech s uvažovanou retenční křivkou s novými parametry bylo lokálně (ve vybraných pozicích senzorů) dosaženo mnohem lepší shody než pro původní parametry převzaté z definice modelů experimentu BRIE.

Průběhy relativní vlhkosti ve vrtu DA3551G01 (Obr. 7.6) přibližně do času 8 let (3000 dní) ukazují v některých bodech relativně dobrou shodu. V bodech WB513T a WB526T odpovídají počáteční hodnoty hodnotám naměřeným, ale v pozdějších časech model relativní vlhkost v bentonitu nadhodnocuje. V bodech WB533T a WB536T je naopak naměřený stupeň saturace (převedený z relativní vlhkosti) vyšší, než by podle zadání úlohy měl být (v modelech je počáteční hydratace v těchto bodech přibližně 78 %, stejně jako v zadání, naměřené hodnoty se spíše blíží hodnotě 84 %). Z měření je tedy patrné, že doporučená počáteční podmínka ze zadání experimentu v blízkosti rozhraní válcových bloků a prstenců zcela neodpovídá realitě. V pozdějších časových krocích však mezi měřenými a simulovanými průběhy v bodech WB533T a WB536T nejsou patrné výraznější rozdíly (v bodě WB536T jsou simulované průběhy mírně podhodnocené).

V modelu vrtu DA3545G01 (Obr. 7.7) jsou rozdíly výraznější – i díky tomu, že naměřené průběhy nejsou tak hladké jako u vrtu DA3551G01. V bodech WB635T a WB653T podobně jako u vrtu DA3551G01 odpovídá počáteční nasycení a v dalších časových krocích jsou opět relativní vlhkosti z modelů vyšší než naměřené hodnoty. V bodech WB604T a WB651T je počáteční hydratace rozdílná a dále modely hydrataci podhodnocují.

Bylo provedeno také vyhodnocení stupně saturace v modelech obou vrtů v podélných a příčných řezech s novými parametry retenční křivky. Z výsledků se ukázalo, že i když simulované průběhy relativní vlhkosti ve vybraných bodech lépe odpovídají naměřeným závislostem než pro původní parametry, globálně jsou oba vrty mnohem více nasyceny – v čase 8 let jsou spodní části obou modelů saturovány na 92 %, zbylé části vrtu DA3551G01 jsou saturovány minimálně na 95 % a zbylé části vrtu DA3545G01 na minimálně 97 %.

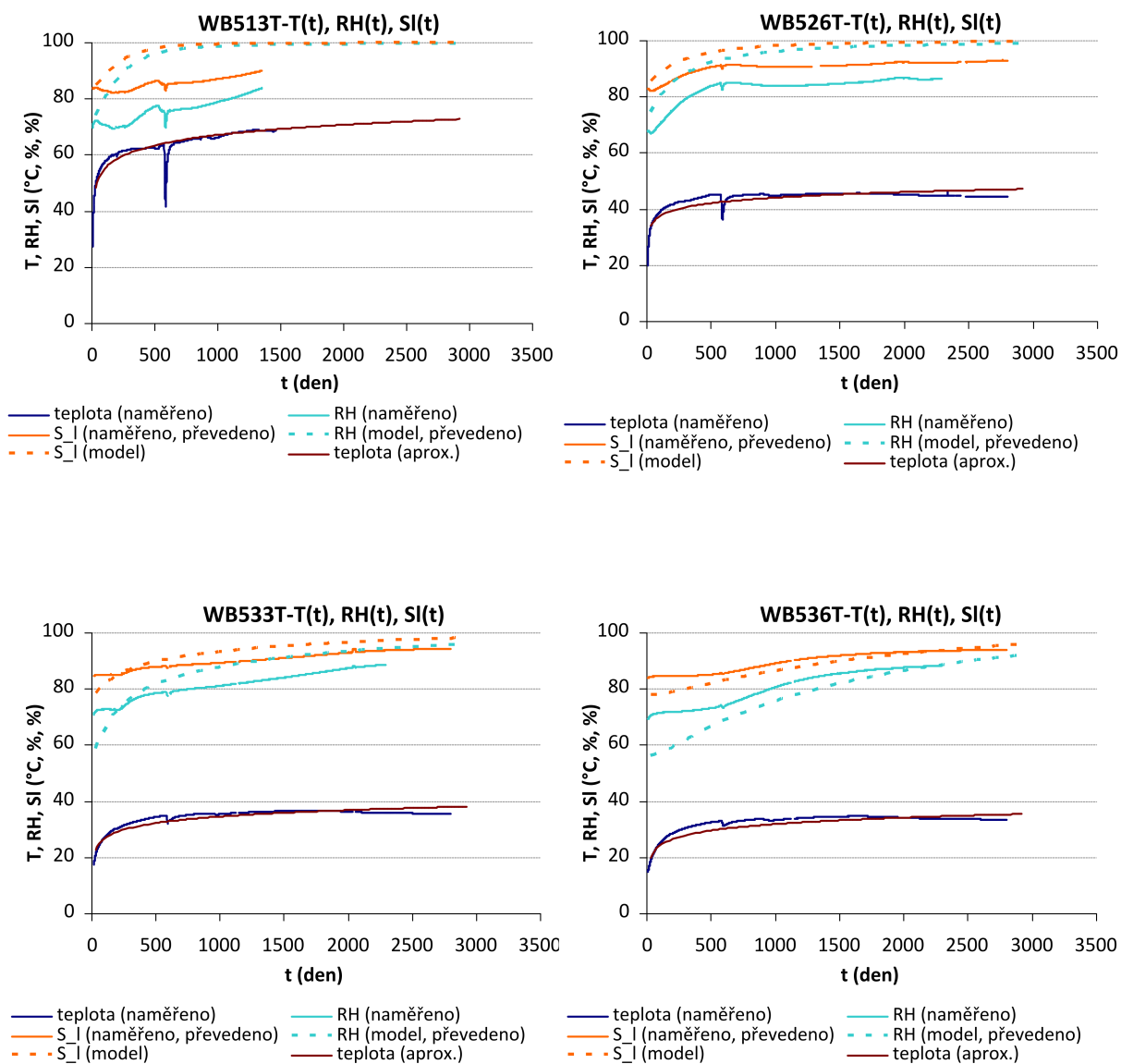
7.2.4 Vyhodnocení

V modelech experimentu Prototype Repository jsme vyhodnocovali hydrataci bentonitu ve dvou samostatných vrtech se shodnou geometrií lišící se rozložením přítoků. Bylo zde využito několik in situ měření, ať už k definici modelu, ale také k porovnání s výstupními daty.

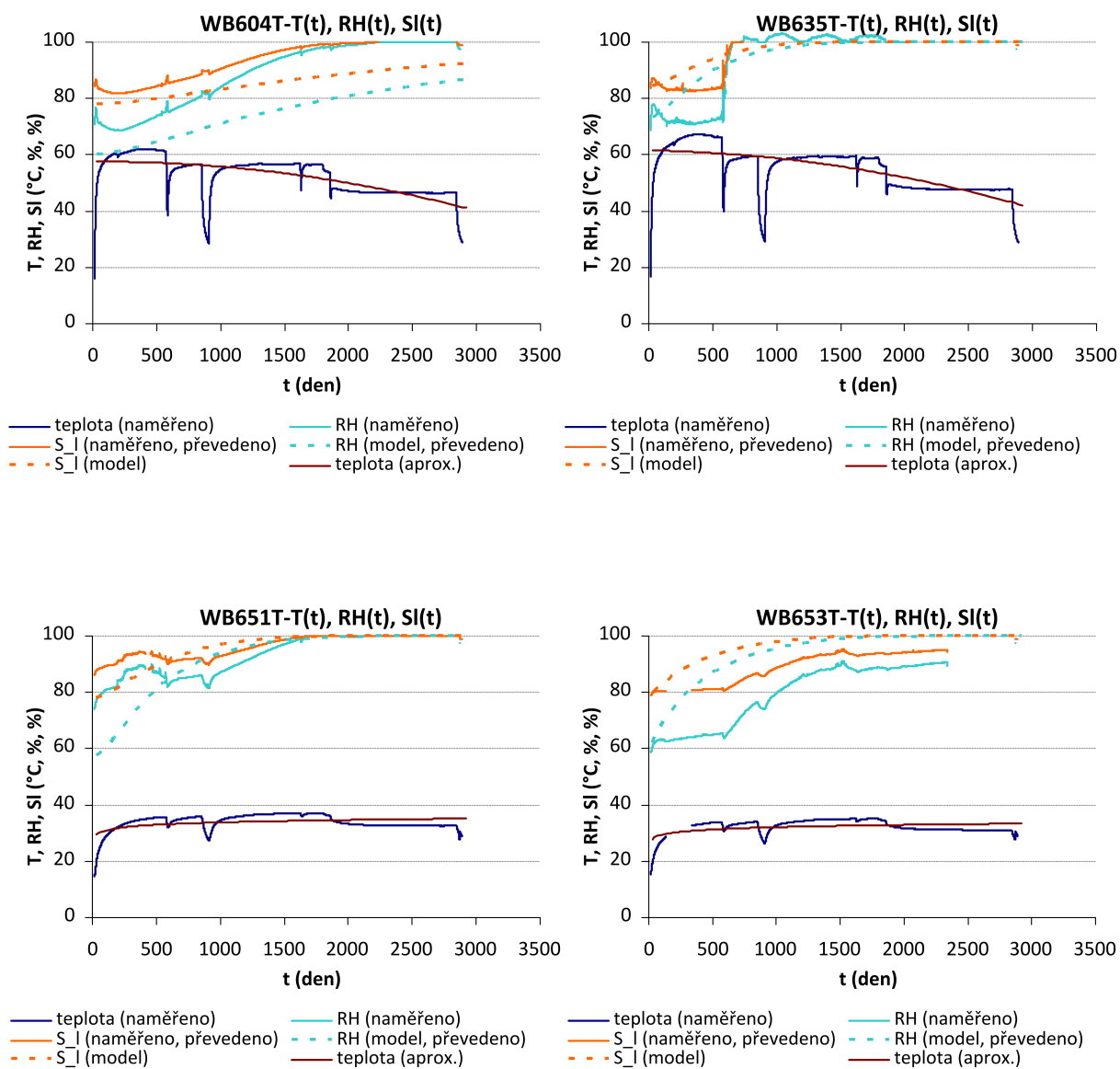
Modely byly řešeny v několika variantách s rozdílnými typy a velikostmi okrajových podmínek odvozených z provedených in situ měření a reprezentujících zdroje, kterými se bentonit hydratuje. Okrajové podmínky byly předepsány buď na pozice detekovaných přítoků z experimentu se savým materiálem nebo na pozice zvodněných puklin.

Okrajová podmínka plné saturace představuje neomezený zdroj vody a v modelech, v nichž byla předepsána na pozice podle experimentu s absorpčním materiálem, kvantitativně a kvalitativně nejlépe odpovídá rozložení stupně saturace v jednotlivých řezech ve sledovaném čase 8 let. Při lokálním porovnání průběhů relativní vlhkosti však nedochází k výrazné shodě (dokonce ani v počátečních hodnotách stupně saturace). Proto byly modely přepočítány pro rozdílné parametry retenční křivky převzaté z modelů k experimentu „Canister Retrieval Test“ s obdobně definovanými počátečními stupni saturace v bentonitu. V tomto případě průběhy stupně saturace/relativní vlhkosti odpovídají díky použitým parametrům retenční křivky lépe.

Modely s okrajovou podmínkou toku umožňují regulovat přítok vody do bentonitu, ale díky konstantní hodnotě toku je zde možné překročit 100% saturaci, k čemuž dochází v pozdějších časových krocích v okolí míst, kde byla okrajová podmínka předepsána. Celkově tyto varianty vykazují vyšší nasycení (oproti měřeným datům i modelům s okrajovou podmínkou plné saturace), ale v některých případech je také dosaženo poměrně dobré shody.



Obr. 7.6: Průběhy relativní vlhkosti a stupně saturace v pozicích senzorů označených: WB513T, WB526T, WB533T a WB536T, porovnání model vs. měření pro vrt DA3551G01 v experimentu Prototype Repository



Obr. 7.7: Průběhy relativní vlhkosti a stupně saturace v pozicích senzorů označených: WB604T, WB635T, WB651T a WB653T, porovnání model vs. měření pro vrt DA3545G01 v experimentu Prototype Repository

Závěr

Disertační práce popisuje a zhodnocuje možnosti využití numerických simulací pro výzkum procesu saturace bentonitové bariéry v rámci hlubinného úložiště. Oproti podobně zaměřeným pracím se soustředí na nehomogenní přítok podzemní vody z horniny a tím i na nerovnoměrné podmínky syčení bentonitu.

Simulace navazují na probíhající výzkum v rámci mezinárodního projektu „Task Force on Engineered Barrier Systems“ (TF EBS), konkrétně na dva rozsáhlé terénní experimenty: „Bentonite Rock Interaction Experiment“ (BRIE) a „Prototype Repository“. Společnou vlastností obou experimentů jsou podmínky s nehomogenním přítokem podzemní vody. Odlišují se např. v měřítku (rozměrech vrtů), měřených datech a v neposlední řadě i způsobu měření přítoků a v průběhu experimentu. Prototype Repository se snaží vystihnout chování hlubinného úložiště jako celku, BRIE se naopak zaměřuje na detailní analýzu procesů na rozhraní bentonit-hornina.

V simulacích byla využita méně obvyklá koncepce podle [8] pro popis proudění v částečně saturovaném prostředí, ve které je běžně zavedená Richardsova rovnice vyjádřena pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou. Modely prezentované v disertační práci ukázaly, že je pomocí této koncepce možné simulovat hydrataci bentonitu bez větších omezení. Jeho hlavní výhodou je, že model lze snadno definovat v běžně dostupných simulačních nástrojích a není tedy třeba specializovaný kód. Simulace byly úspěšně realizovány ve výpočetním nástroji ANSYS včetně řešení sdruženého hydro-mechanického problému.

V první fázi byla použitelnost koncepce úspěšně ověřena na jednodušších modelech popsanych v kapitolách 6.3 a 6.4. Kalibrací na referenční výpočet [7] byl v rámci těchto simulací rovněž upřesněn materiálový model – konkrétní parametry propustnosti pro bentonit a horninovou matici. K výraznější změně došlo pouze u hodnoty propustnosti horniny, kde se všeobecně předpokládají nehomogenní a nejisté podmínky.

Aplikovatelnost takto definované koncepce byla potvrzena na složitějších simulacích navazujících na terénní experimenty (BRIE a PR) v kapitolách 6 a 7, které vystihují proces hydratace bentonitu ve vrtech pomocí 3D modelů různě složité geometrie. Klíčovými jsou ale definované okrajové podmínky, které vystihují v odlišných formách jednak nehomogenní přítoky do vrtů prostřednictvím puklin, jednak rovnoměrně distribuovaný přítok pomocí horninové matrice. Tímto způsobem lze poměrně snadno vyřešit modely, které jsou komplikované (obzvláště díky jednodušší realizaci geometrie obsahující větší množství puklin v horninové matici).

Bylo provedeno také posouzení vlivu propustnosti okolní horniny na syčení bentonitu. Na základě provedených simulací lze říci, že vliv horniny na hydrataci ben-

tonitu může být v určitém rozsahu propustností výrazný. Úlohy definované v rámci disertační práce jsou na propustnost horniny poměrně citlivé – při změně parametrů horniny se řádově změní i rychlost hydratace, z čehož vyplývá nutnost uvažovat tuto nejistotu i při plánování hlubinného úložiště.

Rychlost syčení může být zároveň ovlivněna přítomností puklin v horninové matici a hlavně jejich počtem a distribucí podél vrtu. Těmito vlastnostmi se konkrétně zabývají modely v kapitole 6.5, ve kterých je patrné výrazné zrychlení hydratace při vyšším počtu puklin (zrychlení dosažení plné saturace ze stovek let na desítky let u modelů bez vlivu horniny s jednou puklinou vs. s více puklinami). Popsán je i vliv rozložení puklin podél vrtu, který u daných modelů způsobil více než trojnásobný rozdíl v rychlosti syčení.

V rámci disertační práce byla také řešena sdružená hydro-mechanická úloha, jejíž definice vychází z postupu [9] a [40] s využitím nelineárního elastického materiálu a bobtnáním reprezentovaným objemovou roztažností závislou na stupni saturace. Simulace potvrdily možnost využití této koncepce i pro úlohu s netriviální geometrií obsahující puklinu, která způsobuje nerovnoměrné syčení bentonitu (výsledky ukazují, že posunutí dosáhlo v bentonitu v takto definovaných modelech maximálně jednotek cm).

V modelech souvisejících s laboratorními i terénními experimenty bylo využito velké množství měřených dat, která byla uvažována při definici modelů, ale i při porovnání s výsledky simulací. V mnohých případech modely sloužily také ke zpětné analýze experimentálních dat a vysvětlení některých nejistot.

Popsané modely hydratace bentonitu nabízí možnost dalších analýz a navazujících simulací. Zajímavým směrem jsou sdružené procesy (jak hydro-mechanické, tak i syčení ve sdružení s teplotou), které díky vzájemnému ovlivnění kladou vyšší nároky jak na přesnost definice modelu, tak i na výpočetní techniku. Jednou z možností mohou být simulace sdružených procesů v Prototype Repository, kde jsou k dispozici nejen hydraulická data, ale také informace o teplotě a mechanických veličinách a sdružený model by mohl přispět k zpřesnění simulovaných výsledků. Sdružené modely jsou rovněž vhodné k detailnějšímu porovnání se simulacemi s využitím sofistikovanějších modelů pro popis bobtnání.

Další možností pokračování jsou simulace terénních experimentů ve složitějších geometriích s obsaženou horninou, které by byly vhodné k porovnání a zpřesnění simulací uvedených v disertační práci.

V disertační práci jsou na základě numerických simulací popsány některé poznatky, které mohou přispět k plánování hlubinného úložiště. Zároveň jsou zde uvedeny zjištěné doplňující informace o simulovaných jevech, nebo funkčnosti použitých metod. Práce je tedy významným krokem k tomu, aby bylo možné přesněji predikovat průběh syčení bentonitu v hlubinném úložišti v rámci analýzy bezpečnosti, na základě znalostí hydraulických podmínek v hornině z předchozího průzkumu. Zároveň ukazuje možné větší nejistoty v nasycení, které je nutno zohlednit při predikci dalších jevů (tepelná analýza, homogenizace).

Přínosy disertační práce

Přínosy disertační práce můžeme rozdělit do dvou oblastí, které spolu vzájemně souvisejí. První se týká využití metodiky a druhá práce s daty (porozumění simulovaným procesům, práce s experimenty, analýza simulovaných a měřených dat). Přínosy budou tímto způsobem popsány i v následujících bodech.

- Využití nových postupů ve formulaci a řešení modelů sycení bentonitu
 - ověření funkčnosti modelů na konkrétních datech,
 - vylepšení popisu – zahrnutí netriviálních vlastností (nelinearita difuzivity a okrajové podmínky),
 - demonstrace využití koncepce na komplexnějších úlohách (např. více-škálový model – přenos okrajové podmínky),
 - vyhodnocení citlivosti modelovaných procesů – analýza vlivu nehomogeneity hydraulických vlastností (počet a umístění puklin, propustnost horninové matrice) na rychlost a průběh saturace, které slouží jako podklad (upřesnění) pro scénáře v rámci posouzení bezpečnosti úložiště).
- Interpretace dat z in situ experimentů v interakci se zahraničními týmy
 - prokázání, že zachycená skutečnost v simulacích probíhá podle představy o fungování modelu,
 - zjištění a částečně i vysvětlení nepřesností v měřených datech a zkreslujících vlivů na měření,
 - interpretace průběhu hydratace bentonitu, ve vztahu ke konkrétním podmínkám (přesně specifikované pukliny a horninová matrice).

Práce je tedy významným krokem k tomu, aby bylo možné přesněji predikovat průběh sycení bentonitu v hlubinném úložišti v rámci analýzy bezpečnosti, na základě znalostí hydraulických podmínek v hornině z předchozího průzkumu. Zároveň ukazuje možné větší nejistoty v nasycení, které je nutno zohlednit při predikci dalších jevů (tepelná analýza, homogenizace).

Literatura

- [1] Åkesson, M. and Andersson, L.: BRIE – Water Uptake Test. Technická zpráva, Clay Technology AB, Lund, Sweden, 2013.
- [2] Alonso, E., Gens, A., and Josa, A.: A Constitutive Model for Partially Saturated Soils. *Géotechnique* **40** (1990), 405–430.
- [3] AMEC: ConnectFlow – Groundwater Modelling Software. <http://www.connectflow.co.uk>. Online, cit. 2015-06-11.
- [4] Andersson et al.: Full-Scale Testing of the KBS-3V Concept for the Geological Disposal of High-level Radioactive Waste – Prototype Repository. Technická zpráva, European Commission Nuclear Science and Technology, 2005.
- [5] ANSYS Inc.: *ANSYS Academic Research, Help System*. Canonsburg, PA, USA, 2010. Version 13.0.
- [6] Bear, J. and Verruijt, A.: *Modelling Groundwater Flow and Pollution*. Springer Science & Business Media, 1987.
- [7] Bockgård, N., Vidstrand, P., and Åkesson, M.: Task 8 Modelling the Interaction between Engineered and Natural Barriers – An assessment of a Fractured Bedrock Description in the Wetting Process of Bentonite at Deposition Tunnel Scale. Technická zpráva, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2010.
- [8] Börgesson, L.: Water Flow and Swelling Pressure in Non-Saturated Bentonite-Based Clay Barriers. *Eng Geol* **21** (1985), 229–237.
- [9] Börgesson, L., Chijimatsu, M., Fujita, T., Nguyen, T., and Jing, L.: Thermo-Hydro-Mechanical Characterisation of a Bentonite-based Buffer Material by Laboratory Tests and Numerical Back Analysis. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences* **38** (2001), 95–104.
- [10] Börgesson, L. and Hernelind, J.: Consequences of Loss or Missing Bentonite in a Deposition Hole – A Theoretical Study. Technická zpráva SKB TR-06-13, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2006.
- [11] Brdička, M., Samek, L., and Sopko, B.: *Mechanika kontinua*. Academia, Praha, 2000. 2. opr. vyd.

- [12] Březina, J., Stebel, J., Flanderka, D., and Exner, P.: *FLOW123D version 1.8.2, Documentation of File Formats and Brief User Manual*. Technická univerzita v Liberci, Liberec, 2015. <http://flow123d.github.io/>, online, cit. 2015-06-11.
- [13] Brooks, R.H. and Corey, A.T.: Hydraulic Properties of Porous Media. *Hydrology Papers* **3** (1964).
- [14] CEG ČVUT: Bentonit: popis a vlastnosti. <http://ceg.fsv.cvut.cz/vyzkum/bentonit>. Online, cit. 2015-06-11.
- [15] Chalmers University of Technology: Bentonite Rock Interaction Experiment. <http://www.chalmers.se/en/projects/Pages/brie.aspx>. Online, cit. 2015-06-28.
- [16] Chen, Z.: *Finite Element Methods and Their Applications*. Springer Science & Business Media, Berlin, Germany, 2005.
- [17] Chen, G. J. and Ledesma, A.: Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Modeling of the Full-Scale in Situ Test „Prototype Repository“. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering* **135** (2009), 121–132.
- [18] CIMNE: DEMpack Software. <http://www.cimne.com/dem/>. Online, cit. 2015-06-10.
- [19] Císlerová, M. and Vogel, T.: *Transportní procesy ve vadózní zóně*. Fakulta stavební, ČVUT, Praha, 2008.
- [20] COMSOL, A.B.: *COMSOL Multiphysics User's Guide*. COMSOL AB, Stockholm, Sweden, 1 edn., 2012. Version 4.3a.
- [21] Courant, R.: Variational Methods for the Solution of Problems of Equilibrium and Vibrations. *Bull. Amer. Math. Soc* **49** (1943), 1–23.
- [22] Cundall, P.A. and Strack, O.D.L.: A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies. *Géotechnique* **29** (1979), 47–65.
- [23] Diersch, J.: *FEFLOW Finite Element Subsurface Flow and Transport Simulation System*. DHI-WASY, Berlin, Germany, 1 edn., 2012.
- [24] Exner, P.: *Metody rozkladu jednotky pro aproximaci bodových zdrojů vody v porézním prostředí*. Diplomová práce, Technická univerzita v Liberci, 2013.
- [25] Forsmark, T. and Rhén, I.: Prototype Repository. Hydrogeology Drill Campaign 3A and 3B. Technická zpráva SKB IPR-00-08, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2000.
- [26] Forsmark, T. and Rhén, I.: Prototype Repository Hydrogeology – Diaper Measurements in DA3551G01 and DA3545G01, Flow Measurements in Section II and Tunnel G, Past Grouting Activities. Technická zpráva SKB IPR-05-03, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2005.

- [27] Fries, T.P.: XFEM: the Extended Finite Element Method. <http://www.xfem.rwth-aachen.de/>. Online, cit. 2015-06-11.
- [28] Fries, T.P. and Belytschko, T.: The Extended/Generalized Finite Element Method: An Overview of the Method and its Applications. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **84.3** (2010), 253–304.
- [29] Frydrych, D.: ISERIT – Výpočetní systém pro transport tepla a vlhkosti ve formě páry a imobilní vody. <https://emporium.nti.tul.cz/DF2EM/apps/ISERIT/index.html>. Online, cit. 2015-08-04.
- [30] Geiser, J.: *Coupled Systems : Theory, Models, and Applications in Engineering*. Chapman & Hall/CRC Numerical Analysis and Scientific Computing Series, CRC Press, eBook Collection, 2014. EBSCOhost (accessed July 7, 2015).
- [31] Goodman, R.E.: *Methods of Geological Engineering in Discontinuous Rocks*. West Publishing Company, San Francisco, CA, 1976.
- [32] Gourdazi, R.: Prototype Repository – Sensor Data Report (period 010917-130101). Technická zpráva SKB P-13-39, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2014.
- [33] Helmig, R. et al.: Architecture of the Modular Program System MUFTE_UG for Simulating Multiphase Flow and Transport Processes in Heterogeneous Porous Media. *Mathematische Geologie* **2** (1998).
- [34] Herle, I.: *Základy matematického modelování v geomechanice*. Nakladatelství Karolinum UK, Praha, 2003.
- [35] Hokr, M., Novák, J., and Maryška, J.: Výzkum procesů pole blízkých interakcí hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů, Oblast 4: studium THMC procesů probíhajících v úložišti. Technická zpráva Artec TUL, Technická univerzita v Liberci, 2007.
- [36] Hywel R., T., Vardon, P.J., and Cleall, P.J.: Three-Dimensional Behaviour of a Prototype Radioactive Waste Repository in Fractured Granitic Rock. *Canadian Geotechnical Journal* **51** (2013), 246–259.
- [37] Institut geologického inženýrství, Hornicko-geologická fakulta, VŠB-TUO: Nerudní a stavební suroviny. <http://geologie.vsb.cz/loziska/suroviny/nerudy/bentonit.html>. Online, cit. 2015-06-17.
- [38] Itasca Consulting Group, Inc.: FLAC: Two-Dimensional Explicit Finite Difference Program. <http://www.itascacg.com/software/flac>. Online, cit. 2015-08-12.
- [39] Jing, L. and Hudson, J.: Numerical Methods in Rock Mechanics. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* **39** (2002), 409–427.

- [40] Jing, L. and Nguyen, T.S.: Implications of Thermal-Hydro-Mechanical Coupling on the Near-Field Safety of a Nuclear Waste Repository. Technická zpráva BMT1A/WP2, SKI report 2005:24, DECOVALEX III/ BENCHPAR Projects, 2005.
- [41] Jing, L. and Stephansson, O.: *Fundamentals of Discrete Element Methods for Rock Engineering: Theory and Applications*. Elsevier, Amsterdam, 2007.
- [42] Johannesson, L.E.: Prototype Repository – Measurements of Water Content and Density of the Retrieved Buffer Material from Deposition Hole 5 and 6 and the Backfill in the Outer Section of the Prototype Repository. Technická zpráva SKB P-13-14, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2014.
- [43] Karnland, O.: Fundamental Properties of Bentonite, Presentation at NDA Workshop (10.9.2012), 2012.
- [44] Kolditz, O. et al.: *RockFlow Manual, RFD Input Description, Version 3.9*. Center for Applied geosciences, University of Tübingen, and Institute of Fluid Mechanics and Computer Applications in Civil Engineering, University of Hannover, Hannover, Germany, 1 edn., 2003.
- [45] Kristensson, O. and Börgesson, L.: Canister Retrieval Test – Final Report. Technická zpráva SKB TR-14-19, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2015.
- [46] Kristensson, O. and Johannesson, L.E.: Description of the Prototype Repository Test compiled for EBS Task Force. Technická zpráva, Clay Technology AB, Lund, Sweden, 2010.
- [47] Kristensson, O. and Åkesson, M.: Homogenization of Engineered Barriers, Simulations Verified Against Canister Retrieval Test data. *Physics and Chemistry of the Earth* **36** (2011), 1848–1856.
- [48] Kröhn, K.P.: New Conceptual Models for the Resaturation of Bentonite. *Applied Clay Science* **23** (2003), 25–33. Clay Microstructure. Proceedings of a Workshop held in Lund, Sweden, 15–17 October 2002.
- [49] Maaranen, J., Lehtioksa, J., and Timonen, J.: Äspö Hard Rock Laboratory: Determination of Porosity, Permeability and Diffusivity of Rock Samples from Äspö HRL Using the Helium Gas Method. Technická zpráva SKB IPR-02-17, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2001.
- [50] Nádherná and D. Levorová, M.: *Josef Regional Underground Research Centre*. Podzemní stavby 2013, proced., Czech Tunnelling Association ITA-AITES, 2013.
- [51] Nahin, P. G.: Swelling of Clay Under Pressure. *Clays and Clay Minerals* **3** (1954), 174–185.

- [52] Nilson, U.: Prototype Repository – Validation of Retrieved Sensors from the Prototype Experiment at Äspö Hard Rock Laboratory. Technická zpráva SKB P-13-31, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2014.
- [53] Olivella S. et al.: Numerical Formulation for a Simulator (Code_Bright) for the Coupled Analysis of Saline Media. Engineering Computations **13** (1996), 87–112.
- [54] Open Cascade: SALOME: The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation. <http://www.salome-platform.org/>. Online, cit. 2015-07-21.
- [55] Pedroso, D. M. and Farias, M. M.: Extended Barcelona Basic Model for Unsaturated Soils under Cyclic Loadings. Computers and Geotechnics **38** (2011), 731–740.
- [56] Posiva Oy: Basics of the Final Disposal. http://www.posiva.fi/en/final_disposal/basics_of_the_final_disposal#.VYFd_lLkWzk. Online, cit. 2015-06-17.
- [57] Rhén, I. and Forsmark, T.: Äspö Hard Rock Laboratory – Prototype Repository – Hydrogeology – Summary Report of Investigations before the Operation Phase. Technická zpráva SKB IPR-01-65, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2001.
- [58] Richards, L.A.: Capillary Conduction of Liquids through Porous Mediums. Physics **1** (1931), 318–333.
- [59] Roscoe, K.H. and Burland, J.B.: On The Generalised Stress-Strain Behaviour of 'Wet' Clay. Eng. plasticity **1** (1968), 535–609.
- [60] Schanz, T., Nguyen, T., L., and Datcheva, M.: Thermo-Hydro Mechanical Column Experiment to Study Expansive Soil Behaviour. Multiphysical Testing of Soils and Shales. Springer Berlin Heidelberg (2013), 125–130.
- [61] SKB Svensk Kärnbränslehantering AB: KBS-3V: Method of Final Disposal. <http://www.skb.com/future-projects/the-spent-fuel-repository/our-methodology/>. Online, cit. 2015-07-21.
- [62] Smellie, J. et al.: Matrix Fluid Chemistry Experiment – Final Report. Technická zpráva SKB TR-03-18, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2003.
- [63] Straka, T.: *Modelování nesaturovaného proudění na rozhraní bentonitu a žuly v hlubinném úložišti*. Bakalářská práce, Technická univerzita v Liberci, 2012.
- [64] SÚRAO: Úložiště radioaktivních odpadů. <http://www.surao.cz/cze/Uloziste-radioaktivnich-odpadu>. Online, cit. 2015-08-18.
- [65] Svoboda, J.: The Experimental Study of Bentonite Swelling into Fissures. Clay Minerals **48** (2013), 383–389.

- [66] van Genuchten, M. T.: A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal* **44** (1980), 892–898.
- [67] Vilks, P., Miller, N.H and Stanchell, F.W.: Laboratory Program Supporting SKB's Long Term Diffusion Experiment. *Technická zpráva* 06819-REP-01300-10111-R00, Atomic Energy of Canada Limited, Canada, 2005.
- [68] Villar, M. and Lloret, A.: Influence of dry density and water content on the swelling of a compacted bentonite. *Applied Clay Science* **39** (2008), 38–49.
- [69] Villar, M.: FEBEX Project Final Report: Post-Mortem Bentonite Analysis. *Publicación técnica* **1** (2006).
- [70] Štáštka, J.: Mock-up Josef Demonstration Experiment. *Tunel* **23** (2014), 65–73.
- [71] Wang, Q., Tang, A. M., Cui, Y. J., Delage, P. and Gatmiri, B.: Experimental Study on the Swelling Behaviour of Bentonite/Claystone Mixture. *Engineering Geology* **124** (2012), 59–66.
- [72] Widestrand, H. et al.: Long Term Sorption Diffusion Experiment (LTDE-SD) Supporting Laboratory Program – Sorption Diffusion Experiments and Rock Material Characterisation. *Technická zpráva* SKB R-10-66, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2010.
- [73] Wikberg, P.(ed), Gustafson, G., Rhén, I. and Stanfors, R.: Äspö Hard Rock Laboratory: Evaluation and Conceptual Modelling Based on the Pre-investigations 1986 – 1990. *Technická zpráva* SKB TR-91-22, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 1991.
- [74] Zienkiewicz, O., Taylor, R., and Zhu, J.: *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2013, seventh edn.

Seznam publikací autorky

- [75] Škarydová, I., Hokr, M., Solution of Mechanical Problems in Fractured Rock with the User-defined Interface of COMSOL Multiphysics., In *Proceedings of Seminar – Programs and Algorithms of Numerical Mathematics* 17. 1. vyd. Praha: Matematický ústav AV ČR, v.v.i, pp. 200–206. ISBN 978-80-85823-64-6 (2015)
- [76] Hokr, M., Škarydová, I., Frydrych, D., Modelling of Tunnel Inflow with Combination of Discrete Fractures and Continuum, *Computing and Visualization in Science*, Vol. 15, pp. 21–28 (2013)

- [77] Škarydová, I., Hokr, M., Modeling of Bentonite Hydration Using Nonlinear Diffusion Model, *Mathematical Models in Engineering & Computer Science*, NAUN, pp. 124–129, ISBN: 978-1-61804-194-4 (2013)
- [78] Škarydová, I., Hokr, M., Model of Bentonite Swelling Solved as a Contact Problem, *Proceedings of International Conference on the Performance of Engineered Barriers: Backfill, Plugs & Seals*, Federal Institute for Geosciences and Natural Resources (BGR), Germany, pp. 297–301 (2014)
- [79] Škarydová, I., Hokr, Modeling of Bentonite Hydration Process in a High Level Waste Repository, *COMSOL conference 2013*, Rotterdam, Netherlands (2013)
- [80] Škarydová, I., Hokr, Modeling of Bentonite Hydration from Fractured Rock Based on the Field Experiment, *The Fifth International Conference on Porous Media and Annual Meeting of the International Society for Porous Media – InterPore 2013*, Prague, Czech Republic (2013)
- [81] Škarydová, I., Hokr, M., Local Inflow to Bentonite – Solution with Simple Diffusion/Swelling Model, *International meeting "Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement 2012"*, Montpellier, France, book of abstracts, pp. 692–693 (2012)
- [82] Škarydová, I., Hokr, M., Examples of Groundwater Problems with Discrete Features and Singularities, *International Conference on Extended Finite Element Methods – XFEM 2011*, Cardiff, United Kingdom, book of abstracts, pp. 125 (2011)
- [83] Škarydová, I., Hokr, M., Comparison of Different Numerical Solutions of Groundwater Inflow into a Tunnel, *Mathematical Modelling and Analysis – MMA 2011*, Sigulda, Latvia, book of abstracts, pp. 121 (2011)
- [84] Balvín, A., Hokr, M., Škarydová, I., Flow and Transport Modelling Based on Tunnel Water Inflow Observations, *ModelCARE 2011 Repositories of Knowledge in ModelCare* book of abstracts, pp. 148 (2011)
- [85] Škarydová, I., Hokr, M., Modelování podzemního proudění jako sdružené úlohy v 3D-2D-1D geometrii se složitou diskretizací, In: *Seminář numerické analýzy 2010*, sborník z konference, Ústav informatiky AV ČR, v.v.i., 2010, pp. 135–137, ISBN 978-80-87136-07-2 (2010)
- [86] Škarydová, I., Hokr, M., Modelling of Tunnel Inflow with Coupled 3D Groundwater and 2D Surface Flow Concept, In: *HydroPredict 2010*, Prague, Czech Republic, Volume of abstracts, pp. 75–76 (2010)
- [87] Škarydová, I., Hokr, M., Výpočty sdružených úloh napjatosti a proudění pro rozpukanou horninu, *Ph.D. Workshop 2009 proceedings*, Institute of Geonics AS CR, Ostrava (2009)

- [88] Balvín, A., Hokr, M., Škarydová, I. a Rálek, P. Tunnel Inflow in Granite – Fitting the Field Observations with Hybrid Model of Discrete Fractures and Continuum. *Fractured Rock Hydrogeology*. 1. vyd. London: CRC Press / Balkema, pp. 241 – 256. ISBN 9781138001596 (2014)
- [89] Uhlík a kol., Hydrogeologické modely horninového prostředí pro hlubinné úložiště – Rešerše zahraničních přístupů k modelování HÚ, metodika a koncepce řešení, technická zpráva, PROGEO, s.r.o., Roztoky, leden 2015. 138 str. (2015)
- [90] Březina, J., Škarydová, I., Softwarové nástroje pro studium teplotních a hydrogeologických procesů v horninovém prostředí, etapová zpráva za etapu E3.1 pro projekt GeoStab, TUL, Liberec, prosinec 2014, 31 str. (2014)
- [91] Hokr, M., Škarydová, I., Frydrych, D., Novák, J., Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení, 1. průběžná zpráva, TUL, Liberec, listopad 2014, 36 str. (2014)
- [92] Novák, J., Škarydová, I., Frydrych, D., Hokr, M., Balvín, A., Straka, T., Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení, Závěrečná zpráva, TUL, Liberec 98 str. (2013)
- [93] Hokr, M., Frydrych, D., Novák, J., Královcová, J., Škarydová, I., Balvín A., Bruský, I., Verifikace a validace metodik řešení modelových úloh s využitím experimentálních dat (podetapová zpráva 7.3), Zpráva TUL, Liberec, Revize 1, červen 2013, 47 str.(2013)
- [94] Novák, J., Škarydová, I., Frydrych, D., Hokr, M., Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení, Průběžná zpráva č. 3, TUL, Liberec 28 str. (2012)
- [95] Hokr, M., Novák, J., Královcová, J., Škarydová, I., Balvín A., Bruský, I., Rálek, P., Rosická D., Zhodnocení a doporučení pro využití modelů jako prediktivních nástrojů (podetapová zpráva 7.2), Zpráva TUL, Liberec, květen 2012, 62 str. (2012)
- [96] Novák, J., Hokr, M., Balvín, A., Frydrych, D., Škarydová, I., Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení, Průběžná zpráva č. 2, TUL, Liberec 40 str. (2011)
- [97] Hokr, M., Havlíček, J., Škarydová, I., Balvín A., Bruský, I., Šembera, J., Modelování proudění a transportu látky na lokalitě Bedřichov – 3D „Test Case“ v rámci mezinárodního týmu D-2011, Závěrečná zpráva, TUL, Liberec 70 str. (2011)

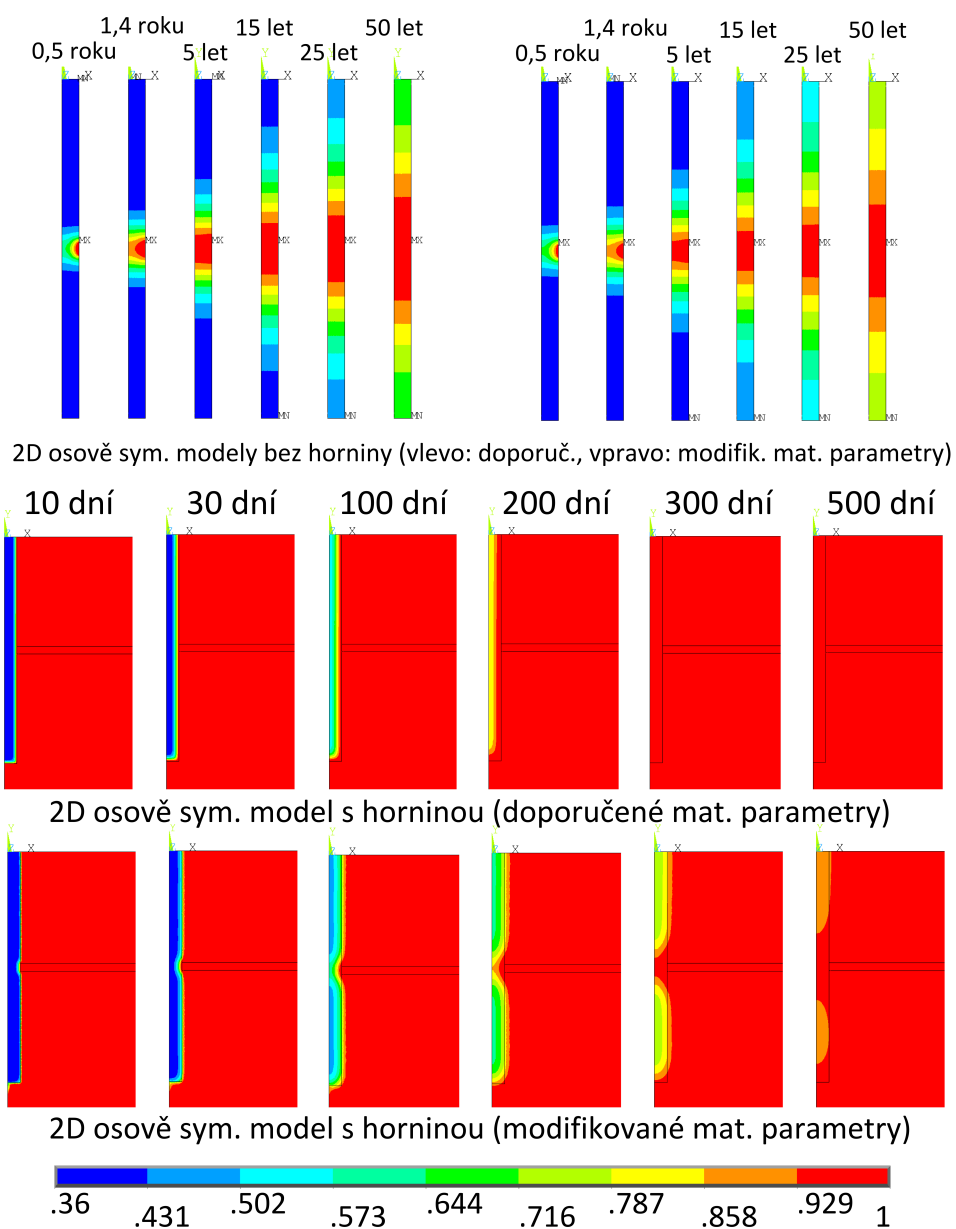
Příloha A

Difuzní a hydraulické parametry dioritu a žuly z lokality Äspö, převzato z [49]

Sample	Rock type	Volume V_B [cm ³]	D_e [m ² /s] ± stdev. of mean	E_p (diff) [%]	N	E_p (pyk) [%]	N	perm [m ²]	N
Ä21	diorite	260.8	$(4.40 \pm 0.05) \cdot 10^{-10}$	0.23 ± 0.02	5	**		$(9 \pm 5) \cdot 10^{-19}$	4
ÄD22	diorite	262.0	$(9.50 \pm 0.00) \cdot 10^{-10}$	0.37 ± 0.02	5	**		*	
ÄD4	diorite	394.3	$4.5 \cdot 10^{-10}$ ****	0.5	1	**		*	
D10	diorite	9.4	$(1.10 \pm 0.05) \cdot 10^{-9}$	0.25 ± 0.01	3	0.42 ± 0.15	5	$(1.1 \pm 0.1) \cdot 10^{-19}$	3
D15	diorite	9.8	$(1.23 \pm 0.04) \cdot 10^{-9}$	0.24 ± 0.01	5	0.31 ± 0.13	5	$(1.49 \pm 0.06) \cdot 10^{-19}$	5
D27	diorite	9.6	$(1.32 \pm 0.06) \cdot 10^{-9}$	0.30 ± 0.01	3	0.34 ± 0.13	5	$(1.45 \pm 0.05) \cdot 10^{-19}$	3
D3	diorite	9.5	$(1.39 \pm 0.13) \cdot 10^{-9}$	0.28 ± 0.01	5	0.44 ± 0.13	5	$(1.6 \pm 0.4) \cdot 10^{-19}$	4
D4	diorite	19.4	$(1.22 \pm 0.01) \cdot 10^{-9}$	0.21 ± 0.01	5	0.33 ± 0.08	5	$(1.2 \pm 0.1) \cdot 10^{-20}$	5
D5	diorite	38.8	$(9.6 \pm 0.4) \cdot 10^{-10}$	0.29 ± 0.01	5	0.22 ± 0.04	5	$(3.3 \pm 0.3) \cdot 10^{-20}$	4
D7	diorite	38.7	$(1.18 \pm 0.01) \cdot 10^{-9}$	0.26 ± 0.01	5	0.30 ± 0.05	5	$(4.4 \pm 0.2) \cdot 10^{-19}$	4
G1*	granite	9.9	$(2.4 \pm 0.3) \cdot 10^{-10}$	0.13 ± 0.01	2	*		$(8 \pm 7) \cdot 10^{-19}$	2
G14	granite	9.6	$(3.6 \pm 0.1) \cdot 10^{-9}$	0.17 ± 0.01	3	0.35 ± 0.16	5	$(1.3 \pm 0.1) \cdot 10^{-19}$	3
G2	granite	20.7	$(2.0 \pm 0.5) \cdot 10^{-10}$	0.20 ± 0.01	5	0.20 ± 0.05	5	$(2.8 \pm 0.5) \cdot 10^{-21}$	4
G26	granite	2.8	$(9.4 \pm 0.2) \cdot 10^{-10}$	0.20 ± 0.01	3	0.35 ± 0.16	5	$(1.4 \pm 0.5) \cdot 10^{-20}$	3
G6	granite	38.9	$(1.9 \pm 0.05) \cdot 10^{-9}$	0.19 ± 0.01	5	0.14 ± 0.05	5	$(2.3 \pm 0.5) \cdot 10^{-20}$	5
G8	granite	9.8	$(6.5 \pm 0.00) \cdot 10^{-10}$	0.14 ± 0.01	3	0.11 ± 0.07	5	$(1.2 \pm 0.4) \cdot 10^{-20}$	3
1	diorite	25.8	$(1.10 \pm 0.00) \cdot 10^{-9}$	0.40 ± 0.00	2	0.32 ± 0.09	5	$(3.5 \pm 0.5) \cdot 10^{-20}$	3
3	diorite	16.6	$(9.80 \pm 0.00) \cdot 10^{-10}$	0.30 ± 0.00	2	0.11 ± 0.07	5	$(1.7 \pm 0.9) \cdot 10^{-19}$	3
4	diorite	26.7	$(2.00 \pm 0.00) \cdot 10^{-10}$	0.20 ± 0.00	2	0.12 ± 0.08	5	$(7.1 \pm 0.9) \cdot 10^{-20}$	3
5	diorite	32.9	$(5.1 \pm 0.5) \cdot 10^{-10}$	0.45 ± 0.15	2	0.13 ± 0.04	5	$(2.6 \pm 0.3) \cdot 10^{-20}$	3
6	diorite	26.7	$(4.5 \pm 0.5) \cdot 10^{-10}$	0.20 ± 0.00	2	0.23 ± 0.05	5	$(9 \pm 4) \cdot 10^{-20}$	3
8	diorite	49.2	$(1.4 \pm 0.7) \cdot 10^{-9}$	0.2 ± 0.1	2	0.13 ± 0.04	5	$(2.4 \pm 0.3) \cdot 10^{-19}$	3

Příloha B

Průběh saturace bentonitu ve 2D osově symetrických modelech v různých časových krocích pro doporučený a modifikovaný materiál



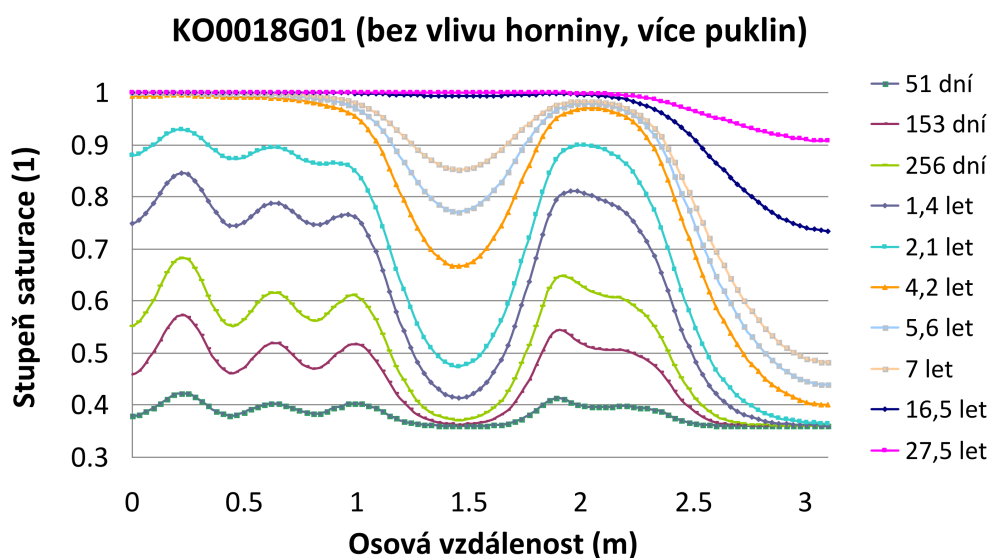
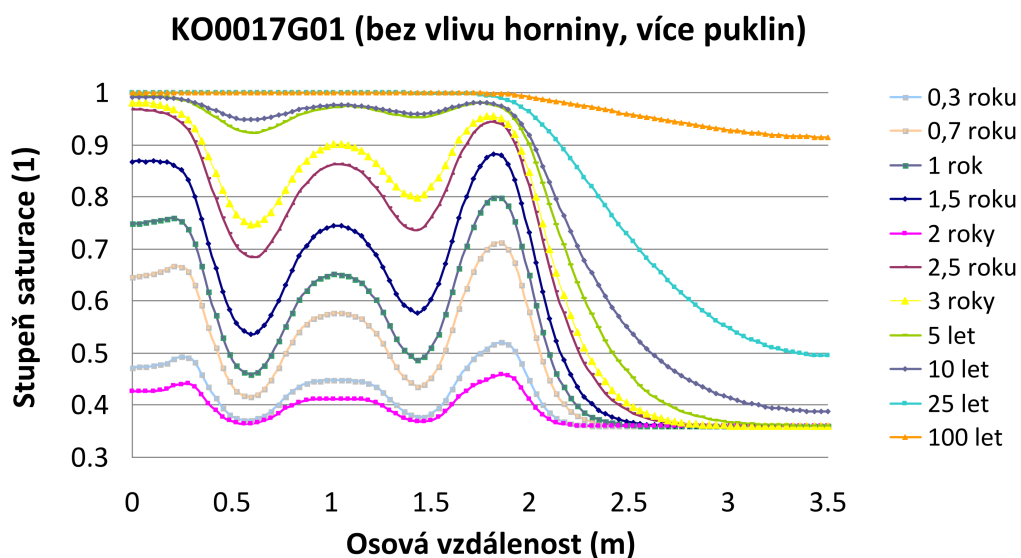
Příloha C

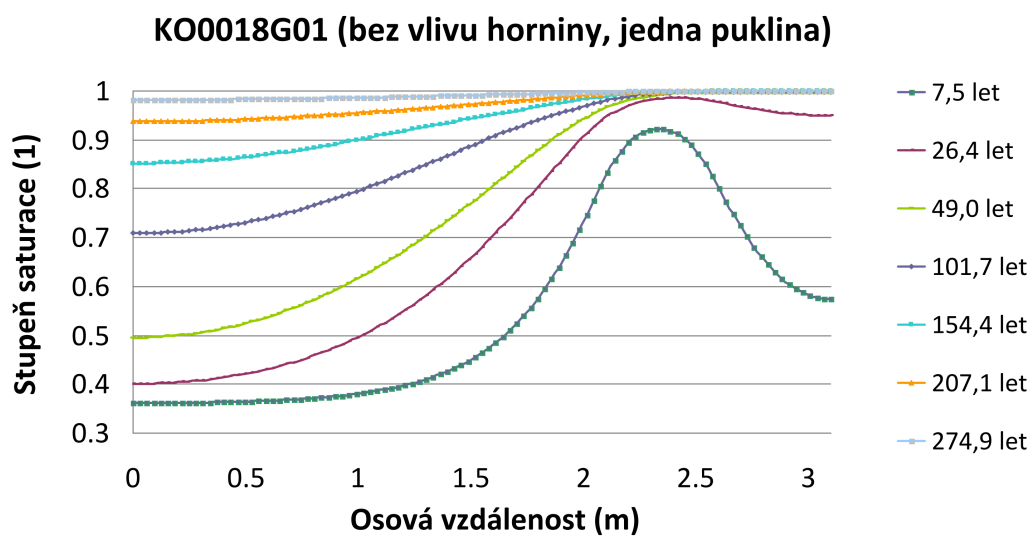
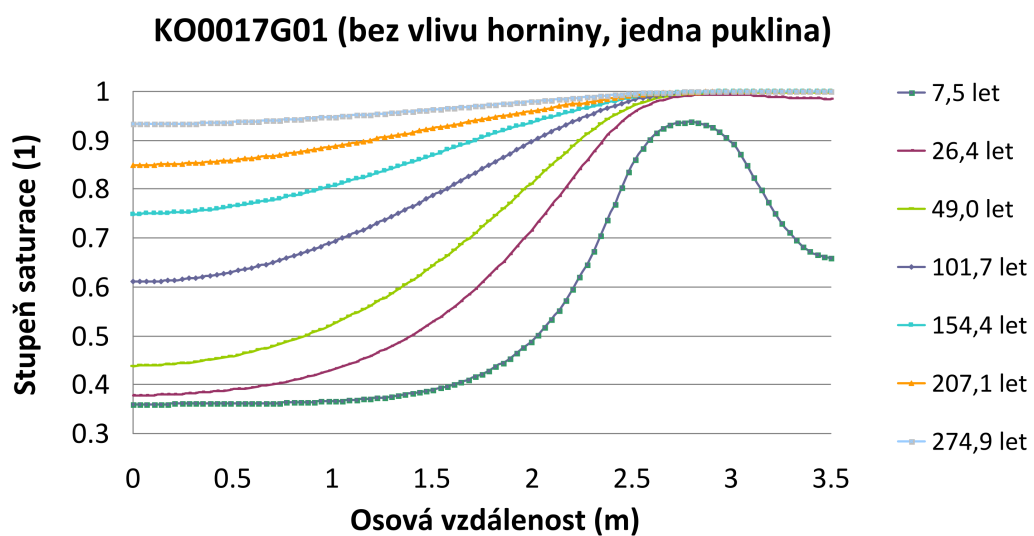
Polohy puklin z dokumentace k experimentu BRIE, vybrány byly pouze otevřené, nebo částečně otevřené pukliny (pro vrt KO0017G01 pět puklin, pro vrt KO0018G01 šest puklin), řádky červeným písmem nebyly zahrnuty buď díky tomu, že uvedené pukliny nejsou propustné, nebo z důvodu malé vzdálenosti od ostatních puklin, což znemožňuje správnou definici sítě

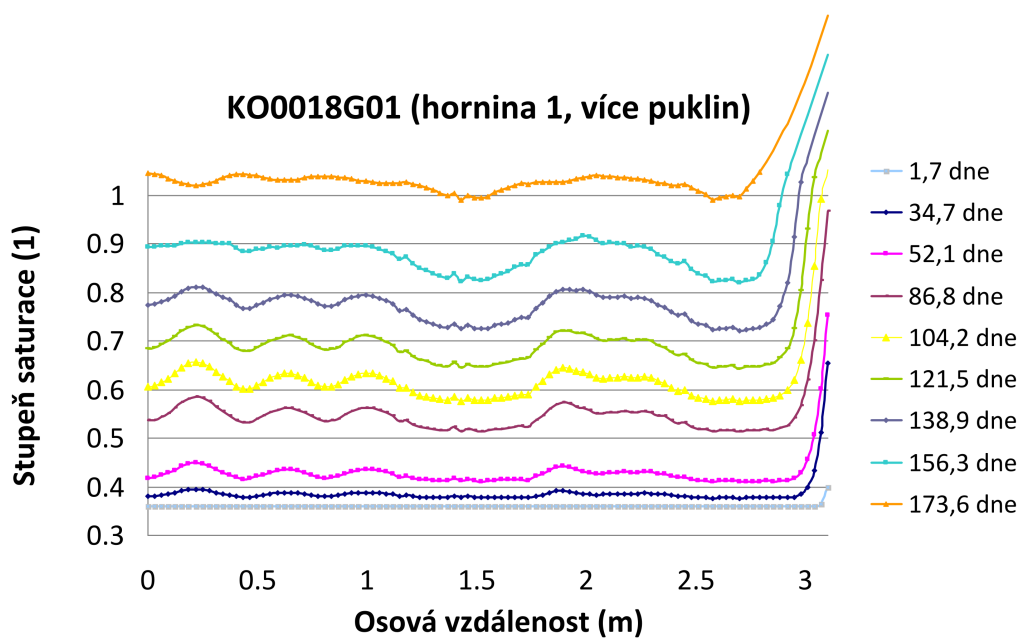
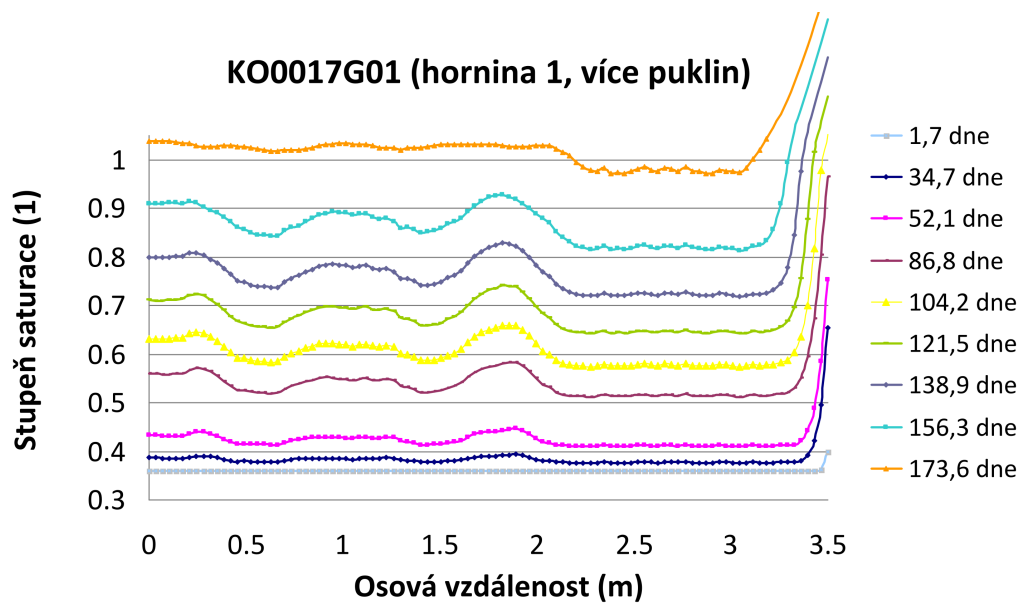
	STRIKE	DIP	ELEVATION	FRACT_MAPPED	FRACT_INTERPRET	APERTURE
	(°)	(°)	(m)			(mm)
KO0017G01	184.3	31.1	-419.02	Broken	Open	1.0
KO0017G01	253.6	59.4	-418.32	Broken	Open	1.0
KO0017G01	166.5	24.8	-417.57	Broken	Open	1.0
KO0017G01	121.2	18.1	-419.20	Broken	Open	0.5
KO0017G01	155.9	49.7	-417.31	Unbroken	Sealed	0.0
KO0017G01	143.4	39.3	-417.28	Unbroken	Partly open	0.5
KO0017G01	0.7	46.2	-417.28	Unbroken	Sealed	0.0
KO0017G01	44.5	38.7	-417.24	Broken	Open	0.5
KO0018G01	234.3	17.0	-419.42	Unbroken	Sealed	0.0
KO0018G01	215.8	18.6	-419.26	Broken	Open	0.5
KO0018G01	249.5	55.2	-419.22	Unbroken	Sealed	0.0
KO0018G01	253.9	40.9	-418.87	Unbroken	Sealed	0.0
KO0018G01	250.2	34.3	-418.36	Broken	Open	0.5
KO0018G01	147.4	30.6	-417.99	Broken	Open	0.5
KO0018G01	94.5	35.9	-417.59	Broken	Open	1.0
KO0018G01	267.5	46.8	-419.58	Broken	Open	0.5
KO0018G01	78.7	23.5	-417.59	Broken	Open	1.0
KO0018G01	91.4	30.4	-417.57	Broken	Open	1.0
KO0018G01	50.9	20.3	-417.26	Broken	Open	0.5
KO0018G01	245.7	9.7	-417.26	Broken	Open	0.5

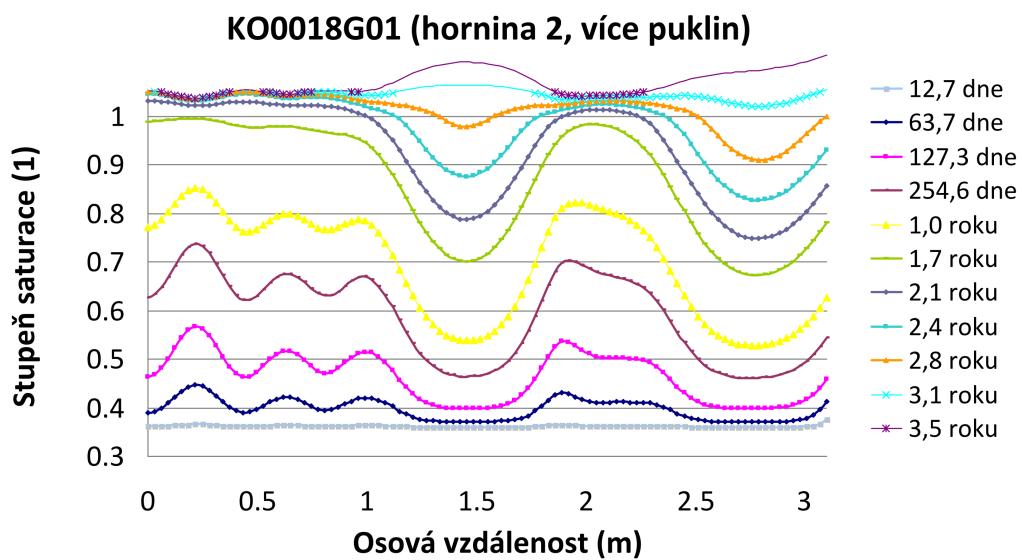
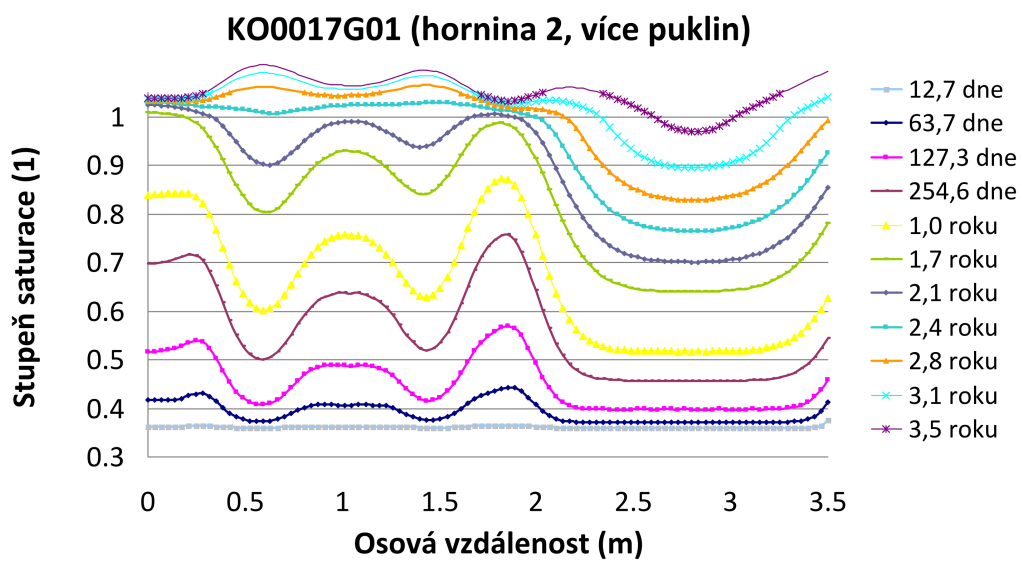
Příloha D

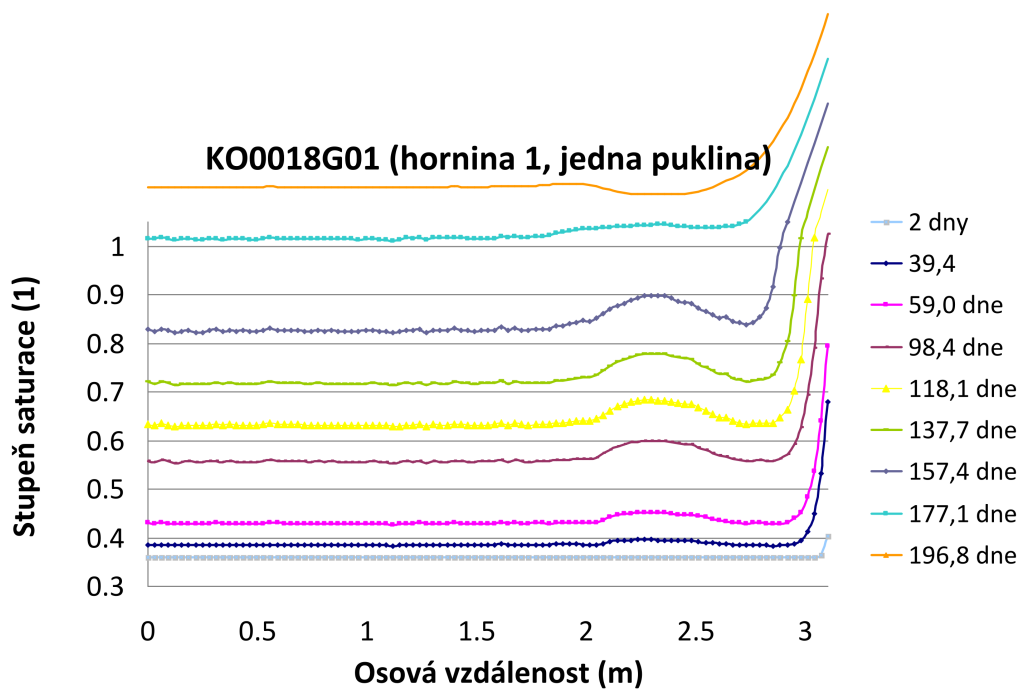
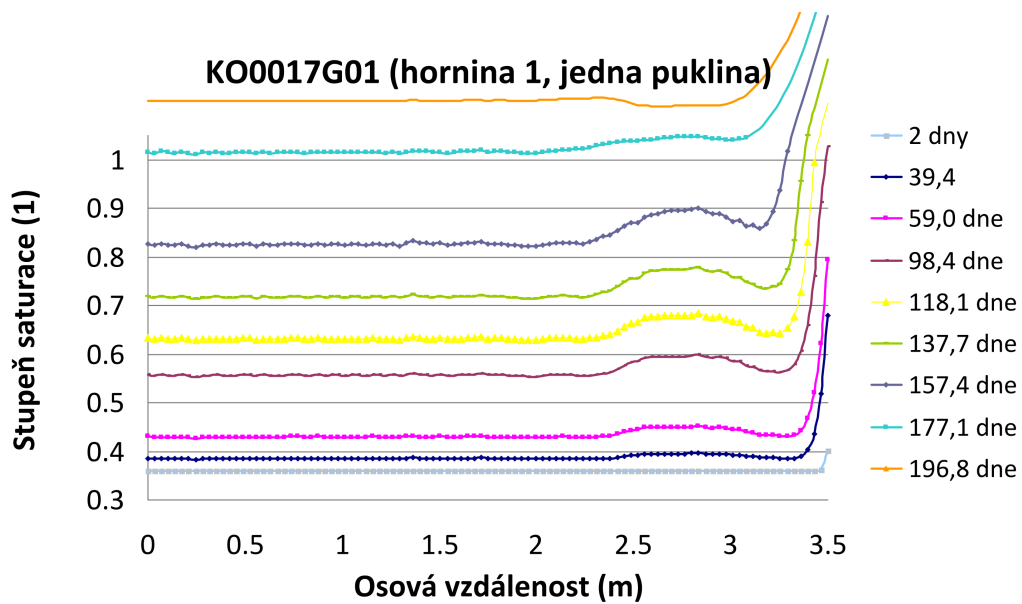
Osový průběh saturace v různých časových krocích pro vrty KO0017G01 a KO0018G01 experimentu BRIE bez vlivu a s vlivem okolní horniny s uvažováním jedné nebo více puklin

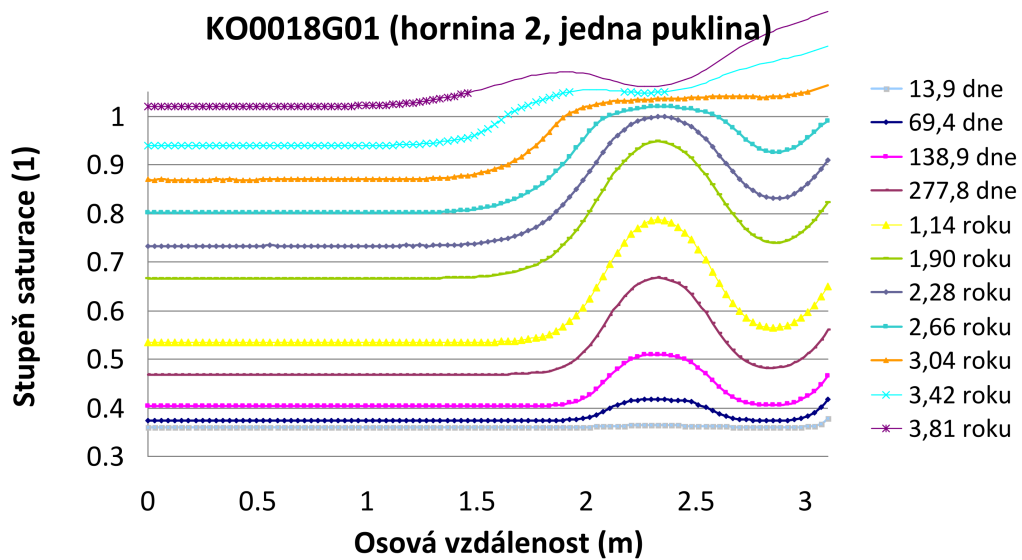
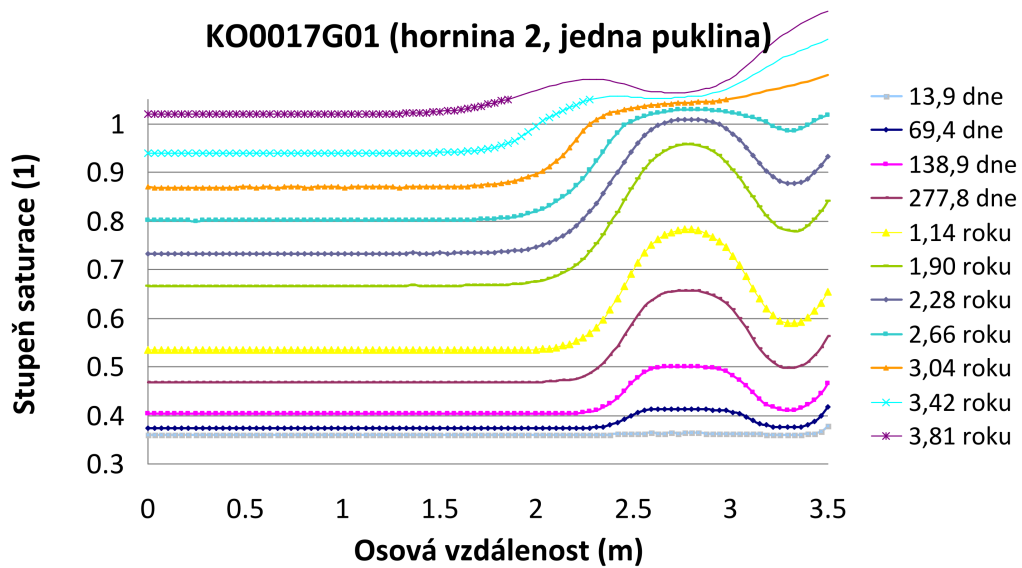








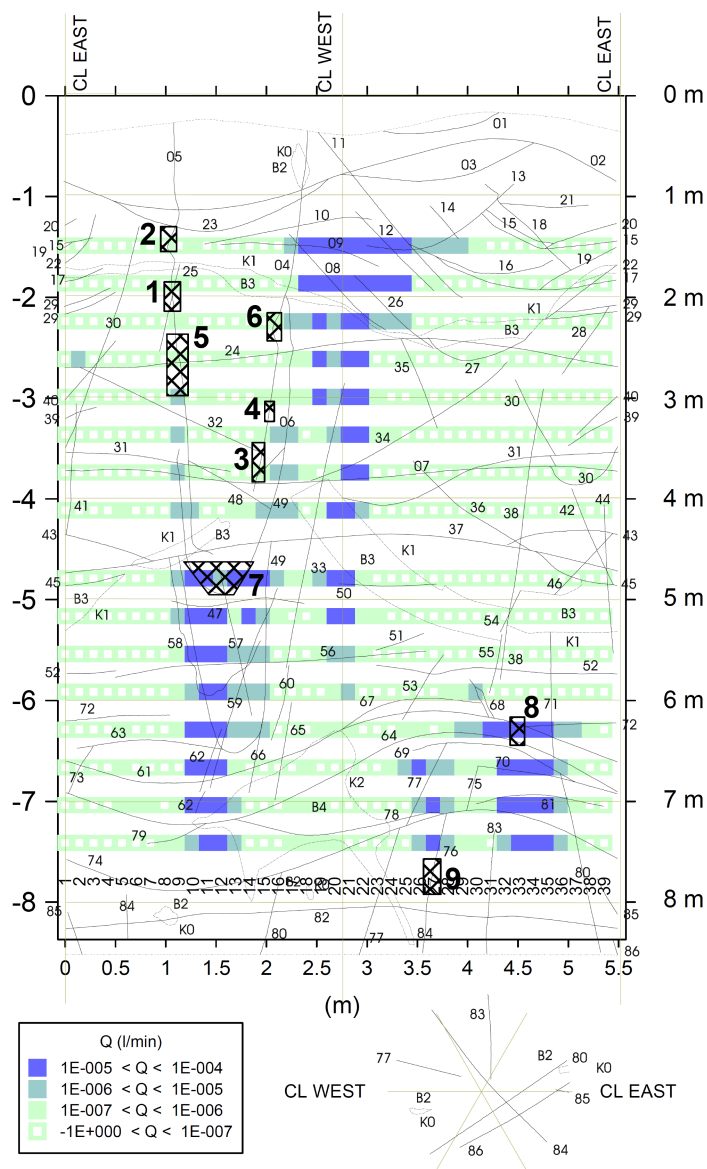




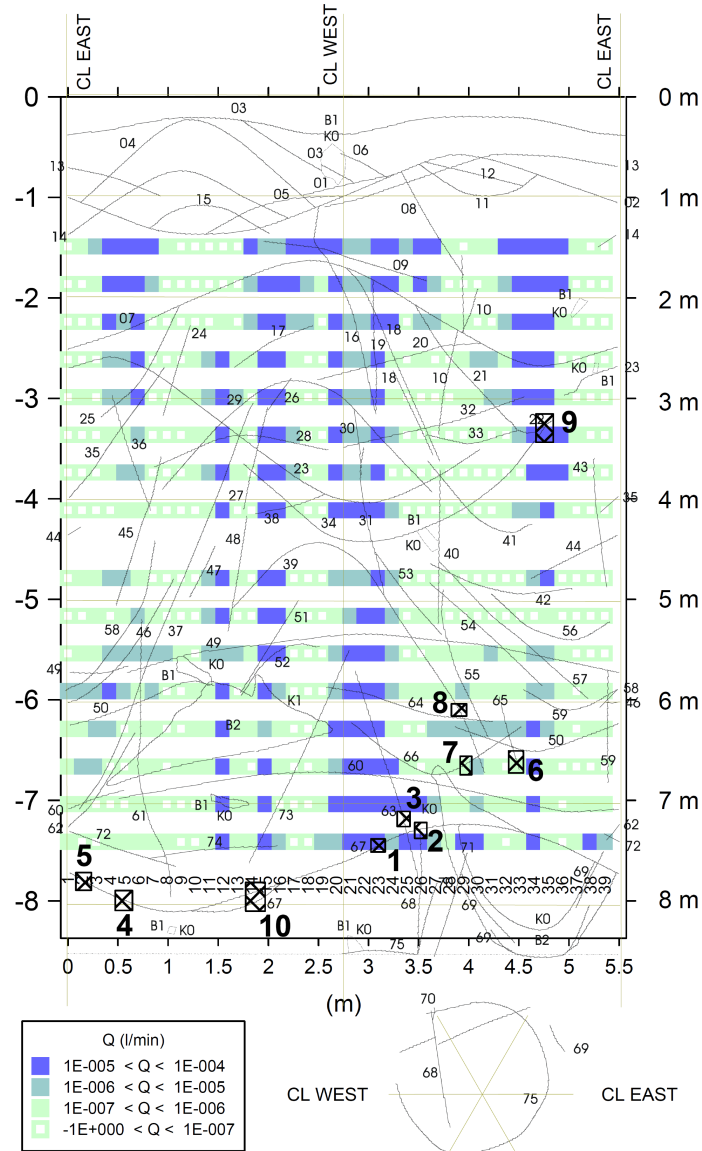
Příloha E

Grafické znázornění měření přítoků do vrtů DA3551G01 a DA3545G01 pomocí sávého materiálu v rámci experimentu Prototype Repository, převzato z [26]

DA3551G01 - INFLOW MEASUREMENTS USING DIAPERS



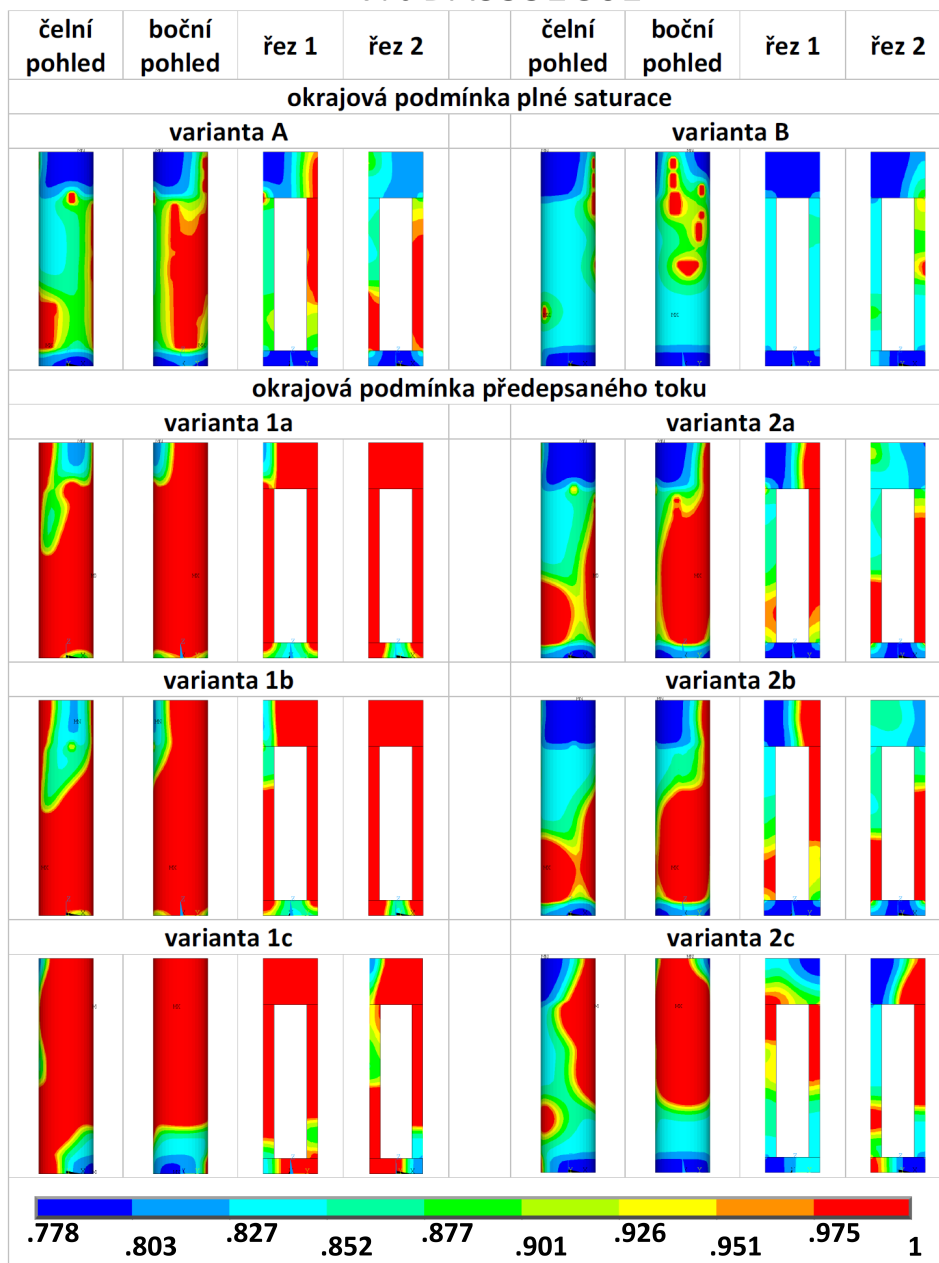
DA3545G01 - INFLOW MEASUREMENTS USING DIAPERS



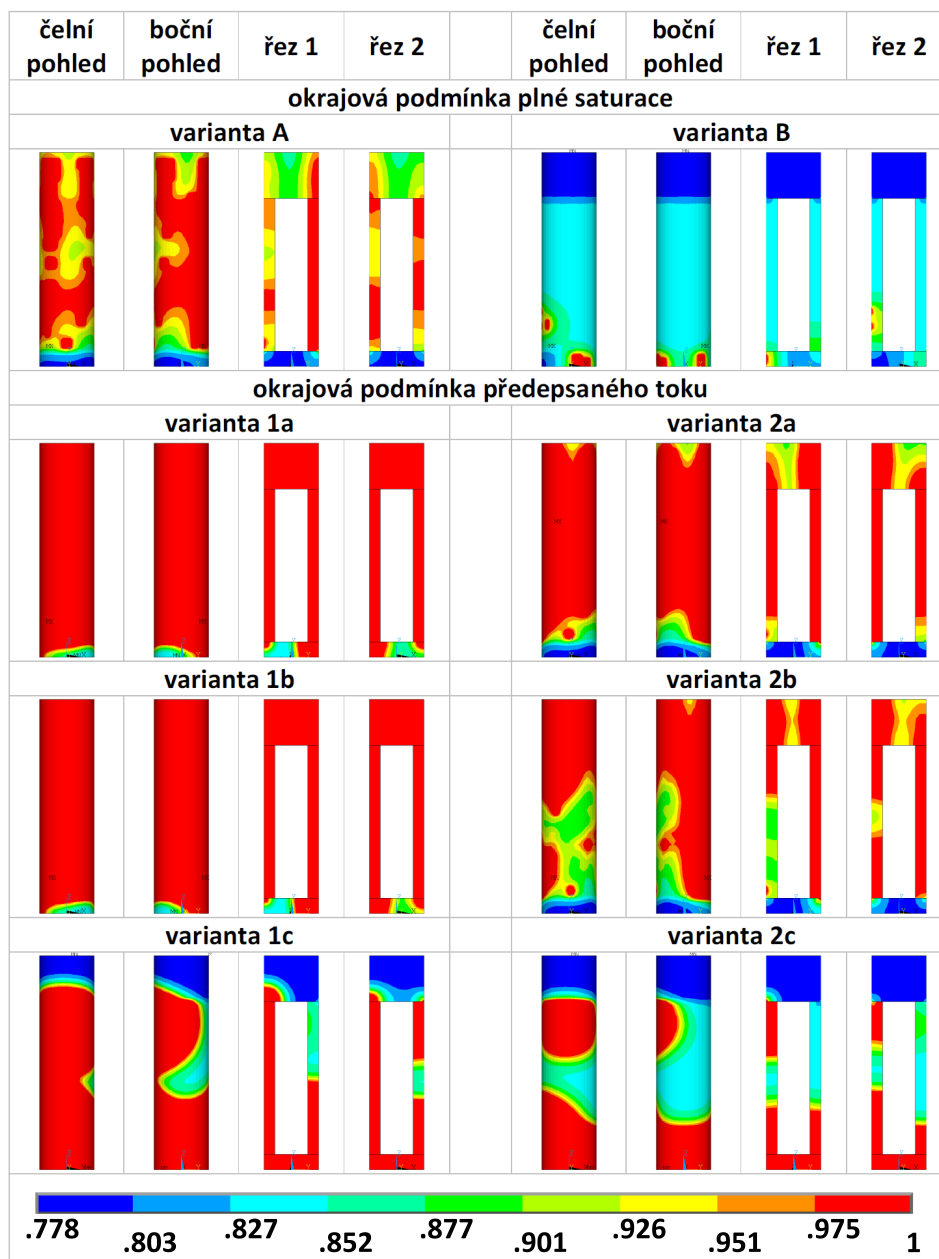
Příloha F

Zobrazení stupně saturace ve vnějším pohledu a dvou na sebe kolmých podélných řezech a vybraných příčných řezech v různých variantách modelů vrtů DA3551G01 a DA3545G01 v čase $2,5 \cdot 10^8$ s

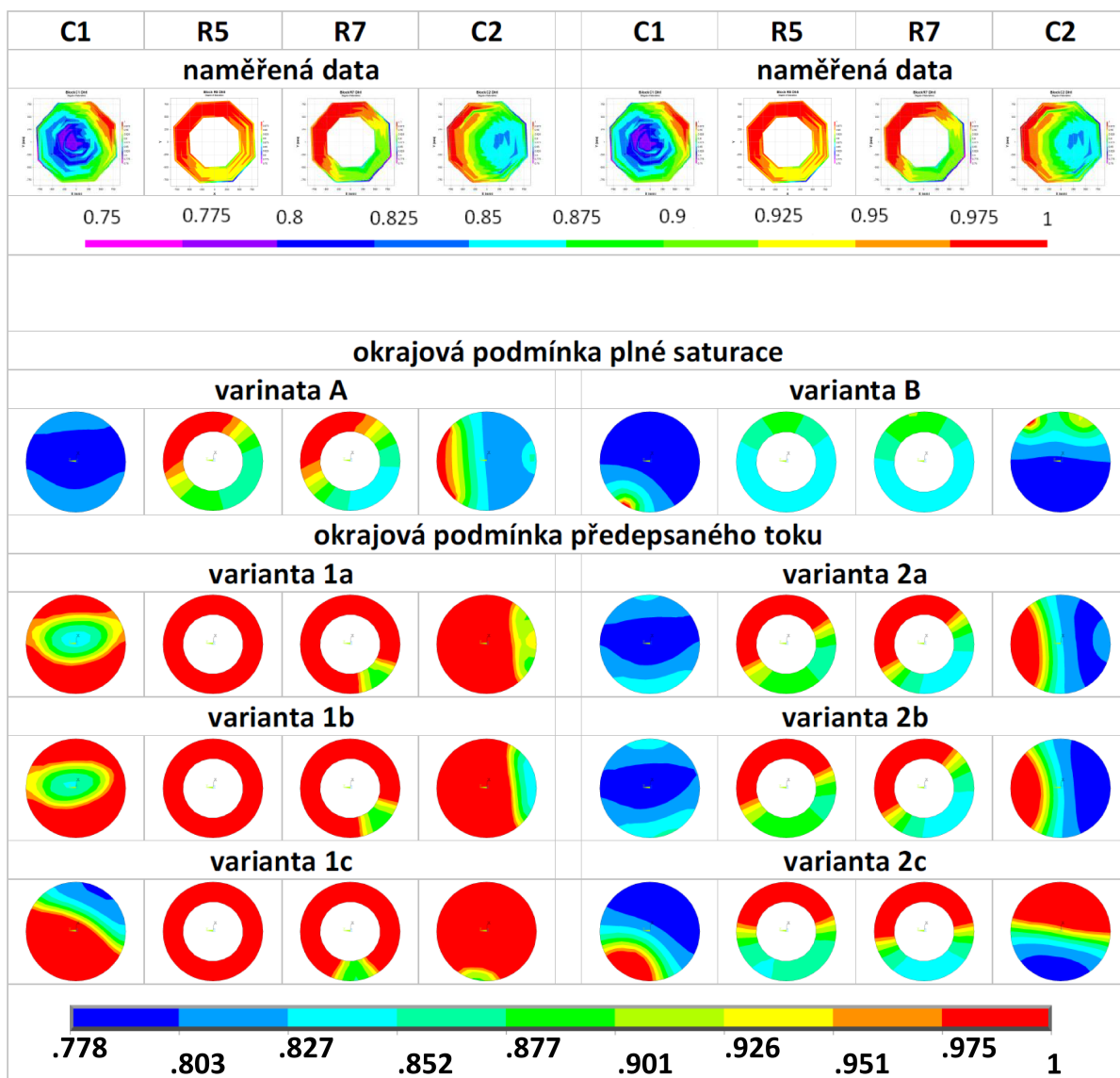
Vrt DA3551G01



Vrt DA3545G01



Vrt DA3551G01



Vrt DA3545G01

